



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I742177 B

(45)公告日：中華民國 110 (2021) 年 10 月 11 日

(21)申請案號：106134917

(22)申請日：中華民國 106 (2017) 年 10 月 12 日

| | | |
|----------------|----------------------------|----------------------------|
| (51)Int. Cl. : | C08G77/46 (2006.01) | C08L83/12 (2006.01) |
| | C08K5/06 (2006.01) | B01F17/54 (2006.01) |
| | C09K3/00 (2006.01) | C08L75/04 (2006.01) |
| | A61K8/894 (2006.01) | A61K8/34 (2006.01) |

(30)優先權：2016/10/18 日本 JP2016-204536

(71)申請人：日商陶氏東麗股份有限公司(日本) DOW TORAY CO., LTD. (JP)
日本

(72)發明人：潘 山 成 PHAN, SON THANH (VN)；田村誠基 TAMURA, SEIKI (JP)；稻垣裕之 INAGAKI, HIROYUKI (JP)；森川育太郎 MORIKAWA, IKUTARO (JP)

(74)代理人：閻啓泰；林景郁

(56)參考文獻：

| | | | |
|----|----------|----|-----------|
| CN | 1626562A | JP | 5-179293A |
| US | 4936917 | | |

審查人員：湯有春

申請專利範圍項數：21 項 圖式數：0 共 86 頁

(54)名稱

聚醚改質聚矽氧組成物、含有其之界面活性劑、整泡劑、聚胺酯發泡體形成組成物、化妝料及其製造方法

(57)摘要

本發明提供一種聚醚改質聚矽氧組成物、其用途及製造方法，所述聚醚改質聚矽氧組成物成本低且能夠大量供應，安全性及環境適應性高，作為包含分散介質在內的整個組成物，在配混穩定性、操作作業性、保存穩定性等品質方面優異，而且在界面活性劑、整泡劑等用途中 useful。一種聚醚改質聚矽氧組成物、其用途及製造方法，所述聚醚改質聚矽氧組成物含有：(A)聚醚改質聚矽氧；以及(B)從(B1)乙二醇醚化合物及(B2)三丙二醇單甲醚中選擇的單醇有機化合物，所述(B1)乙二醇醚化合物的末端氫原子被碳原子數 2 至 8 的烷基取代，且其他末端具有仲醇羥基，碳原子數 2 至 4 的氧化烯單元的重複數處於 2 至 3 的範圍；所述聚醚改質聚矽氧組成物含有異丙醇相對於整個組成物不超過 1 質量%。

公告本
發明摘要

【發明名稱】

聚醚改質聚矽氧組成物、含有其之界面活性劑、整泡劑、聚胺酯發泡體形成組成物、化妝料及其製造方法

POLYETHER-POLYSILOXANE BLOCK COPOLYMER

COMPOSITION, SURFACTANT AND FOAM STABILIZER

INCLUDING SAME, POLYURETHANE FOAM-FORMING

COMPOSITION, COSMETIC, AND PREPARATION METHOD

THEREOF

【中文】

【課題】本發明提供一種聚醚改質聚矽氧組成物、其用途及製造方法，所述聚醚改質聚矽氧組成物成本低且能夠大量供應，安全性及環境適應性高，作為包含分散介質在內的整個組成物，在配混穩定性、操作作業性、保存穩定性等品質方面優異，而且在界面活性劑、整泡劑等用途中 useful。

【解決手段】一種聚醚改質聚矽氧組成物、其用途及製造方法，所述聚醚改質聚矽氧組成物含有：(A)聚醚改質聚矽氧；以及(B)從(B1)乙二醇醚化合物及(B2)三丙二醇單甲醚中選擇的單醇有機化合物，所述(B1)乙二醇醚化合物的末端氫原子被碳原子數 2 至 8 的烷基取代，且其他末端具有仲醇經基，碳原子數 2 至 4 的氧化烯單元的重複數處於 2 至 3 的範圍；所述聚醚改質聚矽氧組成物含有異丙醇相對於整個組成物不超過 1 質量%。

【英文】

無

【代表圖】

【本案指定代表圖】：無

【本代表圖之符號簡單說明】：

無

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：

無

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

【發明名稱】

聚醚改質聚矽氧組成物、含有其之界面活性劑、整泡劑、聚胺酯發泡體形成組成物、化妝料及其製造方法

POLYETHER-POLYSILOXANE BLOCK COPOLYMER

COMPOSITION, SURFACTANT AND FOAM STABILIZER

INCLUDING SAME, POLYURETHANE FOAM-FORMING

COMPOSITION, COSMETIC, AND PREPARATION METHOD

THEREOF

【技術領域】

【0001】 本發明涉及一種新型聚醚改質聚矽氧組成物及其製造方法，所述新型聚醚改質聚矽氧組成物含有(A)具有特定結構的聚醚改質聚矽氧，以及(B)特定乙二醇醚化合物，所述特定乙二醇醚化合物在 5°C 下呈液狀，其分子內具有 1 個仲醇羥基，且不含有氧以外之雜原子，並且所述新型聚醚改質聚矽氧組成物含有異丙醇(IPA)不超過 1 質量%。此外，本發明涉及一種含有該組成物的界面活性劑、整泡劑（包含作為氣泡控制劑及氣泡穩定劑的功能，以下相同）、化妝料原料及化妝料。進而，本發明涉及一種含有該組成物的聚胺酯發泡體形成組成物、以及由此得到的聚胺酯發泡體。

【先前技術】

【0002】 聚醚改質聚矽氧能夠設計平均分子量，能夠藉由聚醚部的EO%及尺寸，向聚矽氧末端部導入羥基或疏水基，利用 2 個以上不同聚醚

基進行改質等方式，對與表面活性及發泡劑的適應性、與聚胺酯泡沫系統的親和性等進行控制，因此在硬質泡沫、半硬質泡沫、HR（高彈性）泡沫、軟質泡沫、或微孔泡沫等所有聚胺酯泡沫處方中，作為氣泡控制或氣泡穩定用界面活性劑有用。另一方面，聚醚改質聚矽氧有在存在水的情況下形成水凝膠而增黏的趨勢，因此有時有用性會受到限制。例如，用於得到聚胺酯泡沫的原料組成物中，通常由異氰酸酯以外的成分（包含多元醇、水、觸媒，有些情況還包含界面活性劑等）組成的所謂預混液的保存穩定性差，有時會產生工業上難以維持長時間均質狀態的問題。此外，與此類似的各成分的相互作用及適應性的相關問題，在作為將若干成分預先混合而成的處方系進行工業生產並銷售（供應）的形態中特別需要注意，要求有一種能夠以均質狀態穩定利用聚醚改質聚矽氧組成物的合適的分散溶劑及製造方法。

【0003】 專利文獻 1、2 報告了利用含 SiH 基有機聚矽氧烷與單側末端含丙烯基聚醚之間的氫化矽烷化反應製造而成的非水解型聚醚改質聚矽氧、以及將該聚矽氧作為氣泡穩定劑或界面活性劑使用的聚胺酯泡沫的製造方法。專利文獻 1 示出了在二甲苯或甲苯溶劑中實施所述氫化矽烷化的示例，專利文獻 2 示出了在 IPA 與甲苯的混合溶劑中實施所述氫化矽烷化的示例。此外，專利文獻 3 公開了在 IPA 溶劑中實施含 SiH 基有機聚矽氧烷與單側末端含丙烯基聚醚之間的氫化矽烷化的示例。這些高揮發性有機溶劑的有害性及引火性等危險風險高，因此在加熱或減壓條件下藉由氣提處理將其從聚醚改質聚矽氧製品系中去除。

【0004】 然而，在普通有機溶劑中進行氫化矽烷化後，藉由減壓氣提

將該有機溶劑去除的情況下，所述聚醚改質聚矽氧的氣泡穩定性優異，因此藉由攪拌而攪入的氣泡細膩，變得非常穩定，氣泡破裂得到抑制，反應器上部空間會立即充滿泡沫，減壓操作不得不非常緩慢地逐步進行。即，所述製造方法不利於工業上的大量生產。

【0005】 為解決該問題，專利文獻 4 提出了在二丙二醇(DPG)等液狀高沸點多元醇溶劑中製造所述聚醚改質聚矽氧，並將該多元醇溶劑殘留在製品系中的方法。但是，DPG 與含 SiH 基有機聚矽氧烷的親和性未必良好，因此特別是在使用大聚合度的該聚矽氧烷的情況下，氫化矽烷化緩慢，結果會產生容易引起脫氫反應、形成乙縮醛等副反應的問題。

【0006】 專利文獻 5 提出了在異十八醇(ISA)等液狀飽和高級醇溶劑中利用氫化矽烷化製造聚醚改質聚矽氧，並將該高級醇殘留在製品系中的方法。此外，報告了這種聚醚改質聚矽氧組成物作為軟質聚胺酯泡沫用界面活性劑有用。專利文獻 6 公開了一種軟質聚胺酯泡沫的製造方法，其特徵在於，在市售的聚醚改質聚矽氧製品中混合異十八醇等支鏈醇後，將其作為氣泡穩定劑使用，並在存在水的情況下使其發泡，另外報告了利用支鏈醇的效果得到微細且沒有缺陷的孔結構。

【0007】 但是，這些高級醇類中烷基在分子中所佔比率大，且親油性強，因此無法斷言其與聚胺酯泡沫形成性組成物中主成分即多元醇的相容性充分。進而，作為硬質聚胺酯泡沫的氣泡穩定劑使用的聚醚改質聚矽氧的 HLB（親水親油平衡）通常比軟質泡沫用聚醚改質聚矽氧大，因此高級醇類存在與這些強親水性聚醚改質聚矽氧的相容性不夠，難以同時使用（作為稀釋劑不合適，在泡沫處方中難以作為破泡劑）的問題。

【0008】 專利文獻 7 提出了在 2,2,4-三甲基-1,3-戊二醇單異丁酸酯 (TEXANOL) 等烷二醇單羧酸酯溶劑中利用氫化矽烷化製造聚醚改質聚矽氧，並將該溶劑殘留在製品系中的方法。而且，報告了由此得到的聚醚改質聚矽氧界面活性劑對軟質、硬質、HR（高彈性）的所有聚胺酯泡沫的品質或性能進行了改善。TEXANOL 與異十八醇相比，分子極性大，甲基支鏈數多，因此在與其他成分的相溶性的方面上有利，與多元醇及聚醚改質聚矽氧的適應範圍得到擴大。

【0009】 但是，聚醚改質聚矽氧具有親水性最大的 PEG（聚乙二醇）均聚物鏈的情況下，特別是在冬季低溫環境下 TEXANOL 的相溶化能力不夠，難以阻止界面活性劑的凝固、分離及白濁，因此留有重新加熱、攪拌溶解等操作上的問題，而得不到解決。除此之外，以下段落介紹的專利文獻 9 指出了 TEXANOL 含有揮發性成分，因此用於汽車內飾用裝飾泡沫時，會使玻璃起霧（模糊）。

【0010】 專利文獻 8 公開了在不含羥基的酯類油中利用氫化矽烷化製造聚醚改質聚矽氧的方法、以及由此得到的組成物。此外，報告了將該組成物作為軟質聚胺酯泡沫用界面活性劑進行評估後，發現其有利於孔結構的均勻性。專利文獻 9 公開了在高沸點天然植物油中利用氫化矽烷化製造聚醚改質聚矽氧的方法、以及由此得到的組成物。此外，報告了將該組成物作為 HR（高彈性）聚胺酯泡沫用界面活性劑進行評估後，發現其有利於孔尺寸的均勻性及減少壓縮永久形變等。

【0011】 但是，專利文獻 8 中進行試驗的酯類油多數凝固點高於 0℃，冬季容易引起起因於酯類油凝固的界面活性劑固化。而且，具有長鏈

烷基等的酯類油有與聚醚改質聚矽氧的相溶性低的趨勢，特別是在大分子量的聚醚改質聚矽氧的情況下，一旦發生固化，加熱熔融時則容易發生相分離，有時即使重新攪拌，溶液亦不會恢復到均勻狀態。

【0012】 另一方面，專利文獻 9 中進行試驗的植物油在與上述酯類油相比凝固點低的方面看起來有利，但是植物油以三酸甘油酯骨架作為基本的分子結構，通常在 1 個分子中具有 3 個酯基。其結果，植物油的分子量大，為普通酯類油的 2 至 3 倍，與聚醚改質聚矽氧的相溶性通常不佳，因此專利文獻 9 的試驗中使用的聚醚改質聚矽氧的用途被限定在 HR 聚胺酯泡沫（汽車座位等內飾用途）用的低分子量（低聚合度）聚醚改質聚矽氧。

【0013】 進而，除了該限制外，在聚胺酯泡沫用界面活性劑中含有這些酯類油、植物油、長鏈烷基苯等高沸點非反應性溶劑的情況下，所述非反應性溶劑有時會殘留在聚胺酯泡沫中，而從最終製品中遷移（滲出），作為溶劑不合適。

【0014】 專利文獻 10 公開了一種將聚醚改質聚矽氧與腰果殼油或其衍生物混合得到的組成物、將該組成物作為聚胺酯泡沫的氣泡穩定劑使用、以及由此得到的泡沫等。

【0015】 但是，腰果殼油是包含漆樹酸、腰果酚、腰果二酚等的長鏈烯基苯酚衍生物的複雜混合物，含有 1 個分子中具有多個酸度高於醇羥基的酚羥基、羧基的成分，因此難以作為製造聚醚改質聚矽氧聚矽氧時的反應溶劑使用。而且，這些長鏈烯基苯酚衍生物與聚醚改質聚矽氧的分子結構差異巨大，因此有時會缺乏相溶性。進而，腰果殼油與其衍生物的著色能力強，因此存在實用面上的用途受到限制的課題。

【0016】 如上述所示，這些專利文獻 1 至 10 中提出的界面活性劑及其用途即氣泡穩定劑特別是作為聚醚改質聚矽氧的溶劑還有不足之處，存在工業生產及使用過程中的不利、技術通用性不夠、或者無法實現足夠的泡沫性能等問題。另外，這些文獻中沒有對本專利發明的成分(B)進行記載或啟發。

【0017】 另一方面，專利文獻 11 及專利文獻 12 公開了非水解型聚醚改質聚矽氧及作為其用途即氣泡穩定劑的使用、以及使用該非水解型聚醚改質聚矽氧的軟質聚胺酯泡沫的製造製程。該專利文獻 11、12 公開了大量溶劑，並公開了為抑制製造矽時的凝膠化趨勢而能夠使用用 $RO(C_3H_6O)_xH$ 表示的溶劑，但是沒有具體公開任何能夠利用該溶劑實現均勻的聚醚改質聚矽氧組成物（溶液）、以及對使用其他溶劑的聚醚改質聚矽氧組成物（溶液）的技術性效果，而只是停留在公開可選擇溶劑的非限定一例。而且，這些大量溶劑中列出了用於製造聚矽氧時會引起反應受阻、反應系不均勻化及凝膠化而沒有實用性的大量溶劑，若要找出最佳溶劑，則需要本行業技術人員進行大量實驗，對這些溶劑的反應性及穩定性進行驗證，而該專利文獻 11、12 缺少選定合適溶劑方面的具體描述。因此，專利文獻 11 及專利文獻 12 沒有明確給出能夠讓本行業技術人員理解將該溶劑有選擇地用於聚醚改質聚矽氧的分散介質的聚醚改質聚矽氧組成物及其技術性收益的相關說明。

【0018】 此外，專利文獻 13 提出了在乙二醇苯醚(PhEG)、丙二醇苯醚(PhPG)等苯醚溶劑中利用氫化矽烷化製造聚醚改質聚矽氧，並將該溶劑殘留在製品系中而得到的組成物。這些溶劑在作為聚胺酯泡沫製造處方中

界面活性劑的含所述聚醚改質聚矽氧的組成物中，對透明性進行改良，並降低凝固點，而不會損害界面活性劑的其他性能。此外，報告了使用 20 質量% PhEG 製造而成的矽氧烷聚合度大的該聚醚改質聚矽氧界面活性劑，與藉由 IPA 溶劑中的氫化矽烷化及其後面的溶劑去除製造而成的對照樣品(改質聚矽氧的設計結構相同)相比，在軟質聚胺酯泡沫的處方中發揮了相同性能。另外，根據該文獻實施例的描述進行計算後，推測本聚醚改質聚矽氧的化學結構式為 $MD_{226}D^*_{13}D^{**}_{17}M(*=C_3H_6O(EO)_{12}-COCH_3, **=C_3H_6O(EO)_{18}(PO)_{18}-COCH_3)$ ，2 種丙烯酸基聚醚相對於各自想要消耗的 SiH 基過剩添加 1.6 倍莫爾，而進行了反應。

【0019】 但是，苯醚溶劑通常昂貴，利用苯醚溶劑的界面活性劑在要求低成本的大部分聚胺酯泡沫市場中存在經濟方面不利的問題。而且，苯醚溶劑自身的黏度略高，因此藉由稀釋來提高聚醚改質聚矽氧的流動性的效果並不明顯。

【0020】 而且，該專利文獻 13 報告了亦能夠在丙二醇單丁醚(BuPG)與二丙二醇單甲醚(MeDPG)中製造與所述相同的設計結構的聚醚改質聚矽氧，但是將所得組成物在低溫下靜置後，逐漸發生了外觀的渾濁、凝集、分離，而使用這些分散溶劑的組成物會妨礙本行業技術人員做出判斷。

【0021】 專利文獻 14 是利用氫化矽烷化製造聚醚改質聚矽氧的方法的相關發明，包括利用連續氫化矽烷化反應製程製造聚醚改質聚矽氧。此外，正文中列舉出能夠進行氫化矽烷化的各種有機溶劑，其中還同時例舉出若干個乙二醇醚類的名稱。進而，雖然有能夠在後步驟中去除氫化矽烷化的溶劑的描述(第 7 頁、段落編號 0023 至第 8 頁、段落編號 0024)，然

而特別是對將(B)特定乙二醇醚化合物作為聚醚改質聚矽氧的溶劑使用（所述特定乙二醇醚化合物在 5°C 下呈液狀，其分子內具有 1 個仲醇經基，且不含有氧以外之雜原子），將該溶劑殘留在改質聚矽氧製品系中，以及這些收益沒有進行任何記載或啟發。

【0022】 另一方面，專利文獻 15 是具有防霧性的玻璃清洗組成物的相關技術，公開了含有 a') 水溶性 C₁₀-C₁₆ 烷基硫酸鹽：0.3 至 5 質量%、b') 從二乙二醇或二丙二醇的單甲醚或單乙醚中選擇的化合物：1 至 5 質量%、c') 異丙醇(IPA)：5 至 15 質量%、d') 水：93.7 至 75 質量%、以及 e') 聚醚改質聚矽氧：0.001 至 2 質量%的組成物。即，本文獻只公開了相對於聚醚改質聚矽氧及 b') 成分過剩或大幅過剩添加 IPA 及水而成的組成物，在本用途中必須大量含有 IPA 及水。即，在含有聚醚改質聚矽氧與特定乙二醇醚化合物的組成物中，對將 IPA 含量控制為不足 1 質量%及其收益沒有進行任何記載或啟發。

【0023】 專利文獻 16 是熱硬化型軟質聚胺酯泡沫用低黏度氣泡穩定劑水溶液的相關技術，該水溶液含有 a") 聚醚改質聚矽氧：40 至 70 質量%、b") 有機界面活性劑：0.5 至 20 質量%、c") 水：10 質量%以上、d") 有機溶劑添加劑：0 質量%以上。此外，作為 d") 的具體示例，正文中記載了選自包含二丙二醇、丁基二乙二醇、乙二醇、二乙二醇、丙二醇、鄰苯二甲酸酯、聚醚、動物及植物油、礦物油及/或液體形態的防凍劑的組中的溶劑。進而，作為防凍劑的合適物質，例如可例舉出低分子量單醇或二醇，例如同樣可例舉出乙醇、異丙醇、二丙二醇、乙二醇或丁基二乙二醇等。此處，丁基二乙二醇是二乙二醇單丁醚(BuDEG)的商品名或簡稱。

【0024】 然而，該專利文獻 16 只是停留在將這些作為非限定大量溶劑的一例進行公開，對聚醚改質聚矽氧、將特定乙二醇醚化合物有選擇地用作分散介質而成的組成物及其技術效果，並未給出具體的指點及啟發。進而，上述組成物為水溶液，在有機溶劑只不過作為任意成分進行添加的方面，基於與使聚醚改質聚矽氧分散到特定乙二醇醚化合物中而成的組成物不同的技術思想，而只公開了水溶液的發明。

【0025】 如上述所示，專利文獻 11 至 16 對聚醚改質聚矽氧、將特定乙二醇醚化合物有選擇地用作分散介質而成的組成物及其技術效果，並未明確地進行公開，亦沒有給出明確的啟發。進而，這些文獻主要公開的組成物特別是作為界面活性劑及聚胺酯泡沫的整泡劑使用的情況下，從其性能、通用性、品質、安全性、環境適應性、以及生產成本的角度來看並不能充分滿足要求。進而，這些文獻公開的組成物用於上述用途後，有時會產生技術上、經濟上的負收益。因此，希望開發出一種含有所述聚醚改質聚矽氧的新型組成物，所述聚醚改質聚矽氧具有穩定的品質與性能，在界面活性劑、整泡劑等用途上具有充分的有用性。

【習知技術文獻】

【專利文獻】

【0026】

【專利文獻 1】英國專利第 955916 號說明書

【專利文獻 2】英國專利第 1149744 號說明書

【專利文獻 3】美國專利第 4122029 號說明書（日本特開昭 54-24959 號公報）

【專利文獻 4】美國專利第 4857583 號說明書（日本特開昭 64-87633 號公報）

【專利文獻 5】美國專利第 4520160 號說明書（日本特開昭 60-156733 號公報）

【專利文獻 6】美國專利第 6506810 號說明書（日本特開 2002-167418 號）

【專利文獻 7】美國專利第 5153293 號說明書（日本特開平 5-125189 號公報）

【專利文獻 8】美國專利第 5648444 號說明書（日本特表平 11-504379 號公報）

【專利文獻 9】美國專利第 6071977 號說明書（日本特開平 10-279688 號公報）

【專利文獻 10】美國專利第 8912277 號說明書（日本特表 2011-512428 號）

【專利文獻 11】美國專利第 3629308 號說明書

【專利文獻 12】美國專利第 3507815 號說明書

【專利文獻 13】美國專利第 5430097 號說明書（日本特開平 7-216089 號公報）

【專利文獻 14】國際公開第 2007/127004 號公報

【專利文獻 15】美國專利第 3249550 號說明書

【專利文獻 16】美國專利第 8034848 號說明書（日本特表 2010-501031 號）

【發明內容】**【發明所欲解決之課題】**

【0027】 本發明為解決上述課題開發而成，提供一種聚醚改質聚矽氧組成物，所述聚醚改質聚矽氧組成物在工業生產上成本低且能夠大量供應，安全性及環境適應性高，作為包含分散介質在內的整個組成物，在方便性、配混穩定性、操作作業性、保存穩定性等品質方面優異，而且在界面活性劑、整泡劑等用途中具有充分的有用性。進而，本發明的目的在於使用該聚醚改質聚矽氧組成物，提供包含該聚醚改質聚矽氧組成物的界面活性劑、包含該聚醚改質聚矽氧組成物的整泡劑。同樣地其目的在於提供包含該組成物的化妝料原料、以及化妝料。

【0028】 此外，本發明的目的在於提供含有所述聚醚改質聚矽氧組成物的聚胺酯發泡體形成組成物、以及由此調製而成的聚胺酯發泡體。

【0029】 進而，本發明的目的在於提供所述聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，所述聚醚改質聚矽氧組成物與過去相比成本低且能夠大量供應給市場，方便性、環境適應性、品質優異。

【0030】 本發明為解決上述課題開發而成，進而，本發明人等對聚胺酯發泡體形成組成物、以及由此調製而成的聚胺酯發泡體，發現了新課題。即，作為近年來聚胺酯發泡體（本說明書中有時簡稱為「聚胺酯泡沫」或「泡沫」）材料的市場需求，低排放性即「Low Emission 特性」的需求增高。這是以從聚胺酯發泡體中產生或揮發的化學物質等分量少作為特徵的要求特性，有時具體表現為從泡沫中產生的揮發成分少(=Low VOC(Volatile Organic Compound))，為預防致病屋、過敏等，從泡沫中向外部經時釋放的

化學物質量少(=Low Emission Of Chemical Compound)，不易引起從汽車內部使用的泡沫中揮發的成分附著後而在車窗玻璃等上產生霧氣的現象(=Low Fogging)等要求，如果排除化學物質的種類及性質的不同點，在源自泡沫的排出成分少的方面，實質意義基本相同。

【0031】 本發明的目的在於提供充分滿足這種 Low Emission 要求的聚胺酯發泡體形成組成物、以及由此調製而成的聚胺酯發泡體。

【解決問題之技術手段】

【0032】 為解決上述課題，本發明人等開展深入討論，其結果發現藉由含有下述成分(A)及成分(B)的組成物，並且含有相對於整個組成物不超過 1 質量%之異丙醇(IPA)的聚醚改質聚矽氧組成物，能夠妥善地解決上述課題，從而完成本發明。

(A) 用下述通式(1)表示的 1 種或 2 種以上之聚醚改質聚矽氧：



(式中，R 分別獨立表示不具有脂肪族不飽和鍵的碳原子數 1 至 30 的 1 價烴基或含矽原子有機基，Q 分別獨立表示用式：
 $-C_x H_{2x} O-(C_2 H_4 O)_{t1} (C_3 H_6 O)_{t2} (C_4 H_8 O)_{t3}-Y$ 表示的含聚氧化烯基有機基(式中，x、t1、t2 及 t3 為滿足 $2 \leq x \leq 8$ 、 $0 \leq t1 \leq 60$ 、 $0 \leq t2 \leq 50$ 、 $0 \leq t3 \leq 50$ 、 $2 \leq t1+t2+t3 \leq 110$ 的數，Y 從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、COCH₃ 基中選擇)，a 及 b 分別為處於 $1.0 \leq a \leq 2.5$ 、 $0.0001 \leq b \leq 1.5$ 範圍的數)；

(B) 從以下(B1)或(B2)中選擇的 1 種或 2 種以上單醇有機化合物，其特徵在於，在 5°C 下呈液狀，其分子內具有 1 個仲醇羥基，且不含有氧以外之雜原子：

(B1) 乙二醇醚化合物，所述乙二醇醚化合物的末端氫原子被碳原子數 2 至 8 的烷基取代，且其他末端具有仲醇羥基，碳原子數 2 至 4 的氧化烯單元的重複數處於 2 至 3 的範圍；

(B2) 三丙二醇單甲醚

【0033】 進而，本發明人等發現藉由含有該組成物的界面活性劑、整泡劑、聚胺酯發泡體形成組成物、化妝料原料或化妝料，能夠妥善地解決上述課題，從而完成本發明。此外，發現藉由由所述聚胺酯發泡體形成組成物得到的聚胺酯發泡體，能夠妥善地解決上述課題，從而完成本發明。

【0034】 而且，本發明人等發現藉由以下聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，能夠妥善地解決上述課題，從而完成本發明。所述聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法至少包含從在以下任意情況下開始或進行有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化反應的步驟中選擇的步驟：

- (1) 實質上沒有溶劑、
- (2) 存在所述(B)成分即單醇有機化合物、或者
- (3) 存在與所述成分(B)不同的揮發性有機溶劑(B')，

在所述(1)或(3)的情況下，進而，至少含有與所述成分(B)即單醇有機化合物進行溶劑交換的步驟。進而，發現藉由含有連續氫化矽烷化製程的製造方法，能夠妥善地解決上述課題，從而完成本發明。

【0035】 即，本發明的目的可藉由以下方式來實現。

[1] 一種聚醚改質聚矽氧組成物，其含有下述成分(A)及成分(B)，並且含有相對於整個組成物不超過 1 質量%之異丙醇(IPA)。

(A) 用下述通式(1)表示的 1 種或 2 種以上之聚醚改質聚矽氧：



(式中，R 分別獨立表示不具有脂肪族不飽和鍵的碳原子數 1 至 30 的 1 價烴基或含矽原子有機基，Q 分別獨立表示用式：
 $-C_x H_{2x} O-(C_2 H_4 O)_{t1} (C_3 H_6 O)_{t2} (C_4 H_8 O)_{t3}-Y$ 表示的含聚氧化烯基有機基 (式中，x、t1、t2 及 t3 為滿足 $2 \leq x \leq 8$ 、 $0 \leq t1 \leq 60$ 、 $0 \leq t2 \leq 50$ 、 $0 \leq t3 \leq 50$ 、 $2 \leq t1+t2+t3 \leq 110$ 的數，Y 從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、COCH₃ 基中選擇)，a 及 b 分別為處於 $1.0 \leq a \leq 2.5$ 、 $0.0001 \leq b \leq 1.5$ 範圍的數)；

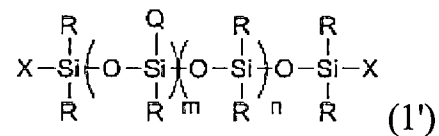
(B) 從以下(B1)或(B2)中選擇的 1 種或 2 種以上單醇有機化合物，其特徵在於，在 5°C 下呈液狀，其分子內具有 1 個仲醇經基，且不含有氧以外之雜原子：

(B1) 乙二醇醚化合物，所述乙二醇醚化合物的末端氫原子被碳原子數 2 至 8 的烷基取代，且其他末端具有仲醇經基，碳原子數 2 至 4 的氧化烯單元的重複數處於 2 至 3 的範圍；

(B2) 三丙二醇單甲醚

優選本發明的目的藉由下述組成物來解決。

- [2] 如[1]所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，成分(A)為用下述通式(1')表示的直鏈狀聚醚改質聚矽氧：



(式中，R 及 Q 為與上述相同的定義，X 為 R 或 Q，n 為處於 0 至 1000 範圍的數，m 為處於 0 至 200 範圍的數。其中，m=0 時，X 的至少一個為 Q)。

- [3] 如[2]所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，通式(1')中，n、m 為處於 $25 \leq m+n \leq 230$ 範圍的數。

- [4] 如[1]至[3]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，通式(1)或通式(1')中，官能基 Q 為除了用 $-\text{C}_x\text{H}_{2x}\text{O}-(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{t1}-\text{Y}$ 表示的含聚氧化乙烯基有機基以外的含聚氧化烯基之有機基 ($2 \leq x \leq 8$ 、 $10 \leq t1 \leq 60$ ，Y 從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、 COCH_3 基中選擇)。

- [4-1] 如[1]至[3]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，優選通式(1)或通式(1')中，用 $-\text{C}_x\text{H}_{2x}\text{O}-(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{t1}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_{t2}(\text{C}_4\text{H}_8\text{O})_{t3}-\text{Y}$ 表示的官能基 Q 滿足 $1 < t2 \leq 50$ ，且必須具有用 $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ 表示的聚丙烯單元的含聚氧化烯基有機基。

- [5] 如[1]至[4]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，成分(B)

為選自由二丙二醇單丁醚、三丙二醇單丁醚、二丙二醇單(異)丙醚、三丙二醇單(異)丙醚、二丙二醇單乙醚、三丙二醇單乙醚、以及三丙二醇單甲醚所組成的群中的 1 種或 2 種以上之單醇有機化合物。

[6] 如[1]至[5]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，成分(B)為蒸餾精製後的 1 種或 2 種以上之單醇有機化合物。

[7] 如[1]至[6]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，所述成分(A)及成分(B)的質量比處於 20/80 至 96/4 的範圍內。

[7-1] 如[1]至[6]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，
優選所述成分(A)及成分(B)的質量比處於 33/67 至 88/12 的範圍內。

[8] 如[1]至[7]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，通式(1)或通式(1')中，官能基 Q 為用 $-C_xH_{2x}O-(C_2H_4O)_{t1}(C_3H_6O)_{t2}(C_4H_8O)_{t3}-Y$ 表示的含聚氧化烯基之有機基，式中，x、t1、t2 及 t3 為滿足 $2 \leq x \leq 8$ 、 $0 \leq t1 \leq 60$ 、 $1 \leq t2 \leq 50$ 、 $0 \leq t3 \leq 50$ 、 $6 \leq t1+t2+t3 \leq 50$ 的數，Y 從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、COCH₃ 基中選擇。

[8-1] 進而，如[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其中，相對於成分(A)及成分(B)的和 100 質量份，在 0 至 300 質量份的範圍內含有(C)從聚烯烴基二醇或其衍生物中選擇的 1 種以上，所述聚烯烴基二醇在 25°C 下呈液狀，其末端經基的其中一個可以由從烷基、芳烷基、芳基中選擇

的碳原子數 1 至 8 的烴基取代，且碳原子數 2 至 4 的氧化
烯單元的重複數處於 4 至 50 的範圍，

整個組成物在 25°C 下的黏度處於 10 至 30,000 mm²/s
的範圍。

此外，本發明的目的可藉由含有所述組成物的以下發明來解決。

[9] 一種界面活性劑，其含有[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧
組成物。

[10] 一種整泡劑，其含有[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成
物。

[11] 一種聚胺酯發泡體形成組成物，其含有[1]至[8]中任 1 項所述的聚
醚改質聚矽氧組成物。

[12] 一種聚胺酯發泡體形成組成物，其含有：

- (a) 多元醇、
- (b) 聚異氰酸酯、
- (c) 觸媒、
- (d) 含有[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物的整泡
劑、以及
- (e) 從(d)成分以外的整泡劑、發泡劑、稀釋劑、鏈伸長劑、交聯
劑、水、非水性發泡劑、填充劑、強化劑、顏料、染料、著
色劑、阻燃劑、抗氧化劑、抗臭氧劑、紫外線穩定劑、防靜
電劑、殺菌劑及抗菌劑所組成的群中任意選擇的至少一種添
加成分。

- [13] 如[11]或[12]所述的聚胺酯發泡體形成組成物，其中，相對於(a)多元醇 100 質量份，以 0.3 至 8.0 質量份的範圍含有如[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物中的(A)聚醚改質聚矽氧。
- [14] 一種聚胺酯發泡體，其由[11]至[13]中任 1 項所述的聚胺酯發泡體形成組成物獲得。
- [15] 如[14]所述的聚胺酯發泡體，其為硬質泡沫、半硬質泡沫、HR（高彈性）泡沫、軟質泡沫、或微孔泡沫，具有低排放性(Low Emission 特性)。
- [16] 一種化妝料原料，其含有[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物。
- [17] 一種化妝料，其含有[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物。

特別優選本發明的目的藉由下述製造方法來解決。

- [18] 如[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，其至少包含：在實質上沒有溶劑的情況下開始有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化反應的步驟(I)、以及
- 添加所述成分(B)即單醇有機化合物進行稀釋或促進反應的步驟(II)。
- [19] 如[1]至[8]中任 1 項所述的聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，其至少包含：在存在所述(B)成分即單醇有機化合物的情況下開始或進行有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之

間的氫化矽烷化反應的步驟(I')。

[20] 如[1]至[8]中任1項所述的聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，其至少包含：在存在與所述成分(B)不同的揮發性有機溶劑(B')的情況下開始或進行有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化反應的步驟(I'')、以及

將該揮發性有機溶劑(B')與所述成分(B)即單醇有機化合物進行溶劑交換的步驟(II')。

[21] 如[18]至[20]中任1項所述的聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，其以連續氫化矽烷化製程進行有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化反應。

【發明效果】

【0036】 根據本發明，能夠提供一種聚醚改質聚矽氧組成物，所述聚醚改質聚矽氧組成物在工業生產上成本低且能夠大量供應，作為包含分散介質在內的整個組成物，安全性及環境適應性高，在方便性、配混穩定性、操作作業性、保存穩定性等品質方面優異，而且在界面活性劑、整泡劑等用途中具有充分的有用性。此外，本發明能夠提供含有該組成物的界面活性劑、整泡劑。同樣地能夠提供包含該組成物的化妝料原料、以及化妝料。

【0037】 此外，根據本發明，能夠提供含有所述聚醚改質聚矽氧組成物的聚胺酯發泡體形成組成物、以及由此調製而成的聚胺酯發泡體。

【0038】 進而，根據本發明，能夠提供所述聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，所述聚醚改質聚矽氧組成物與過去相比成本低且能夠大量供應給市場，方便性、品質、環境適應性優異。由此，能夠對過去技術中難以

解決或克服的聚醚改質聚矽氧組成物的性能上課題、與工業生產成本直接相關的製造上課題、以及用途上課題進行綜合解決，使新型聚醚改質聚矽氧組成物在市場上得到充分普及，並作為高性能原料進行利用。

【圖式簡單說明】

無

【實施方式】

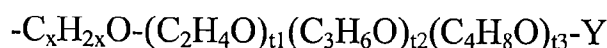
【0039】 以下針對本發明的聚醚改質聚矽氧組成物進行詳細說明。本發明組成物為含有(A)1種或2種以上的聚醚改質聚矽氧、及其分散介質即(B)特定單醇有機化合物的組成物，特別是組成物中的成分(A)/(B)的質量比優選為20/80至96/4，該質量比優選為33/67至88/12。此外，該組成物還可以進一步含有其他任意成分。首先，對各成分進行說明。

[(A)成分]

【0040】 (A)成分為本發明組成物的主成分，為用下述通式(1)表示的1種或2種以上的聚醚改質聚矽氧。



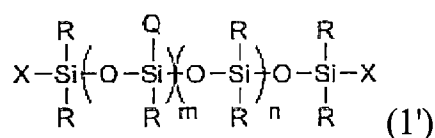
【0041】 通式(1)中，R 分別獨立表示不具有脂肪族不飽和鍵的碳原子數1至30的1價烴基或含矽原子有機基，Q 分別獨立表示用式：



表示的含聚氧化烯基有機基。此處， x 、 t_1 、 t_2 及 t_3 為滿足 $2 \leq x \leq 8$ 、 $0 \leq t_1 \leq 60$ 、 $0 \leq t_2 \leq 50$ 、 $0 \leq t_3 \leq 50$ 、 $2 \leq t_1 + t_2 + t_3 \leq 110$ 的數， Y 為從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、 COCH_3 基中選擇的基。

【0042】 通式(1)中， a 及 b 分別為處於 $1.0 \leq a \leq 2.5$ 、 $0.0001 \leq b \leq 1.5$ 範圍的數。只要處於該範圍內，成分(A)的結構可以採取直鏈狀、支鏈狀、環狀及網狀的任意矽氧烷鏈的形態，但是從使用在界面活性劑、整泡劑、聚胺酯發泡體形成組成物、化妝料原料或化妝料的角度來看，優選為直鏈狀聚醚改質聚矽氧。

【0043】 作為本申請所述的成分(A)，可適當例舉出用下述通式(1')：



表示的直鏈狀聚醚改質聚矽氧。

【0044】 通式(1')中， R 及 Q 為與上述相同的定義， X 為 R 或 Q ， n 為處於 0 至 1000 範圍的數， m 為處於 0 至 200 範圍的數。其中， $m=0$ 時， X 的至少一個為 Q 。即，成分(A)在聚矽氧烷鏈的側鏈、末端或其兩者上具有用 Q 表示的含聚氧化烯基有機基。

【0045】 上述通式(1)或(1')中， R 分別獨立地為不具有脂肪族不飽和鍵的碳原子數 1 至 30 的 1 價烴基或含矽原子有機基，優選獨立地為碳原子數 1 至 10 的烷基或芳基，可列舉出甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、

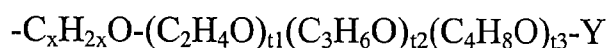
異丁基、仲丁基、戊基、新戊基、環戊基、己基等直鏈狀、支鏈狀或環狀的烷基；以及苯基。工業上優選 R 為甲基或苯基。

【0046】 另一方面，R 的一部分可以為碳原子數 8 至 20 的長鏈烷基；環己基等環烷基；以及甲苯基、二甲苯基、萘基等芳基。

【0047】 同樣地，R 的一部分可以為具有碳矽氧烷樹枝狀結構的含矽原子有機基，亦可以為具有鏈狀矽氧烷結構（矽氧烷大分子單體）的含矽原子有機基。具體而言，這些官能基例如在日本特開 2013-151658 號公報等中，可以為作為官能基 L1 公開的含矽原子有機基，並且優選為作為官能基 L1 公開的含矽原子有機基。

【0048】 工業上優選 R 為甲基或苯基，但是藉由一部分含有上述長鏈烷基、含矽原子有機基等，特別是在用於化妝料的情況下，有時與其他原料的親和性、乳化性能、使用觸感等會得到改善。

【0049】 Q 為與矽原子鍵合的含聚氧化烯基有機基，用式：



進行定義。此處，x 為與矽原子鍵合的烯基的碳原子數，滿足 $2 \leq x \leq 8$ ，該官能基由烯基衍生的情況下，x 優選為處於 2 至 6 範圍的數。Y 為聚氧化烯結構的末端基，從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、 $COCH_3$ 基中選擇。從作為整泡劑的有用性、以及改質聚矽氧的穩定性、安全性的角度來看，優選 Y 為氫原子或甲基。另外，通式(1)或(1')中，Q 可以為同一分子內 2 種以上不同的含聚氧化烯基有機基。

【0050】 t_1 、 t_2 、 t_3 為構成聚氧化烯結構的氧化乙烯單元、氧化丙烯單元、以及氧化丁烯單元的個數，為滿足 $2 \leq t_1+t_2+t_3 \leq 110$ 的數，優選 $6 \leq t_1+t_2+t_3 \leq 50$ ，更優選 $8 \leq t_1+t_2+t_3 \leq 40$ 。 t_1 、 t_2 、以及 t_3 分別滿足 $0 \leq t_1 \leq 60$ 、 $0 \leq t_2 \leq 50$ 、 $0 \leq t_3 \leq 50$ ，基於後述理由，優選 $1 \leq t_2 \leq 50$ 。

【0051】 本發明中，如果 Q 只由氧化乙烯單元組成，則與成分(B)的相溶性可能降低，優選為具有氧化丙烯單元或氧化丁烯單元。特別優選 Q 至少具有 1 個氧化丙烯單元，上述式中優選滿足 $1 \leq t_2 \leq 50$ ，更優選 $8 \leq t_1+t_2+t_3 \leq 40$ 且 $5 \leq t_2 \leq 30$ 。

【0052】 相反地，本發明中，從與成分(B)的相溶性的角度來看，作為 Q 不優選的含聚氧化烯基有機基為用 $-C_xH_{2x}O-(C_2H_4O)_{t_1}-Y$ ($2 \leq x \leq 8$ 、 $10 \leq t_1 \leq 60$ ，Y 從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、 $COCH_3$ 基中選擇)表示的除去連接烯基(C_xH_{2x})與末端基 Y 後只有聚氧化乙烯結構的官能基，Q 優選為除去這些官能基的含聚氧化烯基有機基。

【0053】 另外，碳原子數 3 以上的與矽原子鍵合的烯基、以及構成氧化丙烯單元或氧化丁烯單元的烯基部分可以為直鏈烯基，亦可以為異丙烯基或異丁烯基等具有支鏈的異烯基。

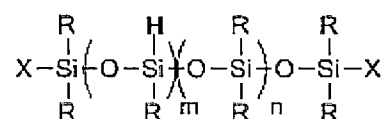
【0054】 通式(1')中， n 、 m 為直鏈狀聚醚改質聚矽氧的矽氧烷聚合度， n 為處於 0 至 1000 範圍的數， m 為處於 0 至 200 範圍的數。 n 優選為處於 1 至 500 範圍的數， m 優選為處於 1 至 150 範圍的數。特別優選 n 、 m 為處於 $25 \leq m+n \leq 230$ 範圍的數。此外，更優選 $n > m$ ， $25 \leq m+n \leq 230$ 且 m 為處於 1 至 50 範圍的數。

【0055】 上述優選的聚醚改質聚矽氧中，其親水性尤其得到改善，並

且必然包含一定量的氧化丙烯單元或氧化丁烯單元，因此聚胺酯泡沫形成組成物的主成分即多元醇及異氰酸酯與整泡劑的相溶性得到改善，在藉由提高預混液穩定性來提高方便性、以及得到所希望的整泡效果等的方面有利。作為界面活性劑或整泡劑的功能、以及合成時或合成後的操作性亦得到改善。

【0056】 這種聚醚改質聚矽氧能偶藉由在存在或不存在任意溶劑的情況下，使分子鏈單側末端具有烯基等碳碳雙鍵的聚醚化合物與有機氫聚矽氧烷進行氫化矽烷化反應來合成。理論上聚醚化合物中的碳碳雙鍵與有機氫聚矽氧烷中的 Si-H 按 1:1 進行反應，因此特別優選按照兩者等量或聚醚化合物略微過剩的量添加後進行氫化矽烷化反應來合成。

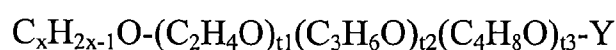
【0057】 特別優選為本發明的(A)成分即聚醚改質聚矽氧為，藉由用下述通式(1'H)：



(式中，R 為與上述相同的定義，X 為 R 或 H，n、m 為與上述相同的數，m=0 時，X 的至少一個為 H)

表示的有機氫聚矽氧烷、與

用下述通式(2)：



(式中， x 、 t_1 、 t_2 及 t_3 為與上述相同的數， Y 為與上述相同的定義， C_xH_{2x-1} 為具有碳碳雙鍵的直鏈狀或支鏈狀烯基)

表示的分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化反應而得到的聚醚改質聚矽氧。

[成分(B)]

【0058】 成分(B)為本發明組成物的特徵成分，為從以下(B1)或(B2)中選擇的 1 種或 2 種以上的特定單醇有機化合物，其特徵在於，在 5°C 下呈液狀，其分子內具有 1 個醇性羥基，且不含有氧以外之雜原子。所述成分(B)為聚醚改質聚矽氧的溶劑，可以作為合成反應中的溶劑被導入到組成物中，亦可以在存在或不存在其他溶劑的情況下進行聚醚改質聚矽氧的合成反應後，在系中以置換溶劑或添加溶劑的形式被導入到組成物中。

【0059】 特別是成分(B)優選為具有能夠進行蒸餾或者藉由蒸餾進行精製的沸點的單醇有機化合物，優選為蒸餾精製後的單醇有機化合物。

【0060】 成分(B1)為乙二醇醚化合物，所述乙二醇醚化合物的末端氫原子被碳原子數 2 至 8 的烴基取代，且其他末端具有仲醇羥基，碳原子數 2 至 4 的氧化烯單元的重複數處於 2 至 3 的範圍，其需要較低的聚合度，並且其中一個末端被烴基封端，另一個末端具有仲醇羥基。作為這種化合物的示例，可例舉出二丙二醇單丁醚、三丙二醇單丁醚、二丙二醇單(異)丙醚、三丙二醇單(異)丙醚、二丙二醇單乙醚、三丙二醇單乙醚等。另一方面，使用例如末端具有伯醇羥基的二乙二醇單丁醚等、末端具有仲醇羥基以外醇

羥基的單醇有機化合物的情況下，在環境適應性及安全性的方面不佳，在無法充分達成本發明的技術效果的方面，並不適合。

【0061】 成分(B2)為三丙二醇單甲醚，為不符合上述成分(B1)定義的、末端氫原子被碳原子數 1 的甲基取代的單醇有機化合物，但是可發揮與成分(B1)相同的技術效果。成分(B2)具有三丙烯氧結構，因此推測這是受到末端基影響，並實現了與類似成分(B1)的聚醚改質聚矽氧的親和性及環境適應性。

【0062】 成分(B)可以單獨為成分(B1)或成分(B2)，亦可以為兩者的混合物。其混合比任意，可以為 2 種以上成分(B)的混合物。但是，使用不符合上述成分(B1)或成分(B2)的單醇有機化合物的情況下，特別是無法作為目標聚醚改質聚矽氧的反應溶劑或分散介質充分發揮作用，可能無法達成本發明的目的。例如，根據本發明人等的討論，如果將不具有仲醇羥基的二乙二醇單丁醚(BuDEG)等用作溶劑來進行氫化矽烷化反應，則在受到原料批次變動等影響而導致反應系中有微量酸性雜質共存的情況下，會產生容易助長脫氫反應、形成乙縮醛等副反應的問題。除此之外，碳原子數 2 至 4 氧化烯單元的重複數為 1 的乙二醇醚化合物的沸點或引火點低，安全性及環境適應性不佳。其中，特別是碳原子數 2 的被稱為溶劑類的簡單結構的化合物組的毒性強，受到各種法律的限制。

【0063】 成分(B)為作為成分(A)的溶劑（分散介質）發揮作用的成分，從該組成物的性能、品質、使用時的方便性、操作作業性（操作）等方面來看，本發明的組成物中，這些成分的所述(A)/(B)的質量比處於 20/80 至 96/4 的範圍內很重要，優選為所述(A)/(B)的質量比處於 33/67 至 88/12

的範圍內。此外，如果組成物中的成分(B)的含量為 20 質量%以上，優選為 25 質量%以上，則特別會具有整個組成物的低溫穩定性得到改善的優點。

【0064】 從使用時的方便性、操作等方面來看，包含所述成分(A)及成分(B)的本發明的聚醚改質聚矽氧組成物在 25°C 下的黏度處於 10 至 30,000 mm²/s 的範圍很重要。

【0065】 此外，本發明的聚醚改質聚矽氧組成物在不影響本發明的技術特徵的範圍內，可以含有二甲基聚矽氧烷、其他聚醚改質聚矽氧等有機改質聚矽氧類類及矽烷類、聚矽氧樹脂等。此時，這些成分(A)以外的有機矽化合物的含量在整個本組成物中，優選為相對於所述成分(A)的質量不超過相同量的範圍，從作為整泡劑或界面活性劑的功能的角度來看，本發明的聚醚改質聚矽氧組成物可以為實質上不含其他有機矽化合物的組成物。

[成分(C)]

【0066】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物進而還可以任意含有(C)從聚烯烴基二醇或其衍生物中選擇的 1 種類以上，所述聚烯烴基二醇在 25°C 下呈液狀，其末端烴基的其中一個可以由從烷基、芳烷基、芳基中選擇的碳原子數 1 至 8 烴基取代，且碳原子數 2 至 4 的氧化烯單元的重複數處於 4 至 50 的範圍。使用所述成分(C)，從而有時能夠對本發明的組成物的黏度等進行調節，對使用時的方便性、操作作業性（操作）進行改善，而不會對作為整泡劑或界面活性劑的功能造成不良影響。此外，有時能夠出於調節聚胺酯發泡體形成組成物的烴基價、即對聚胺酯發泡體之交聯密度及強度等各種物性進行控制的目的，將成分(C)追加到所述聚醚改質聚矽氧組成物

中使用。

【0067】 更具體而言，成分(C)根據是否對末端羥基的其中一個進行取代，可以為從以下成分(C1)及成分(C2)中選擇的 1 種以上，亦可以為成分(C1)及成分(C2)的混合物。

【0068】 成分(C1)為碳原子數 2 至 4 的氧化烯單元的重複數（即，聚氧化烯部分的聚合度）為 4 至 50，且分子鏈兩末端具有羥基的聚烯烴基二醇。這種化合物優選為呈液狀，作為典型的示例，可列舉出具有各種聚合度的聚丙二醇。優選碳原子數 2 至 4 氧化烯單元的重複數為 4 至 35，特別優選為處於 6 至 20 的範圍。

【0069】 成分(C2)為聚烯烴基二醇衍生物，所述聚烯烴基二醇衍生物的末端羥基的其中一個由從烷基、芳烷基、芳基中選擇的碳原子數 1 至 8 烴基取代，另一個為未取代的羥基，分子鏈的中央部由重複數為 4 至 50 的氧化烯單元（其中，該氧化烯從碳原子數為 2 至 4 的氧化烯中任意選擇）組成。這種化合物優選為呈液狀，作為典型的示例，可列舉出具有各種聚合度的聚丙二醇的單丁醚等。優選碳原子數 2 至 4 氧化烯單元的重複數為 4 至 35，特別優選為處於 6 至 20 的範圍。

【0070】 本發明組成物的成分(C)的含量相對於成分(A)及成分(B)的和 100 質量份，為 0 至 300 質量份的範圍，亦可以為 15 至 200 質量份的範圍。此時，整個組成物在 25°C 下的黏度優選為處於 10 至 30,000 mm²/s 的範圍，能夠為了滿足該黏度範圍或者根據所要求的聚胺酯發泡體的物性，來調節成分(C)、成分(A)及成分(B)的含量。

【0071】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物只要在不影響其技術效果

的範圍內，可以含有成分(B)及成分(C)以外的水溶性醇類。作為水溶性醇，可例舉出乙醇、乙二醇、丙二醇、丁二醇、二丙二醇、三丙二醇、二乙二醇、三乙二醇或異丙醇等碳原子數 1 至 4 醇類或者二醇類。

【0072】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物被空氣中的氧氣緩慢氧化而變質。為防止這種現象，能夠並且優選添加苯酚類、對苯二酚類、苯醌類、芳香族胺類、或維他命類等抗氧化劑，增加氧化穩定性。作為這種抗氧化劑，例如能夠使用 BHT (2,6-二叔丁基對甲酚)、維他命 C、維他命 E 等。其中，從減少聚胺酯泡沫排放的排放性 (Emission) 的角度來看，選擇維他命 E 及其他高分子量型抗氧化劑很重要。此時，所使用抗氧化劑的添加量在其質量上相對於聚醚改質聚矽氧為 10 至 1000 ppm，優選為 50 至 500 ppm 的範圍。

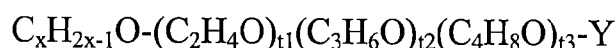
[減少低分子矽氧烷]

【0073】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物優選矽原子數 20 以下的低分子矽氧烷的含量為 5000 ppm (重量) 以下，特別優選為 2000 ppm (重量) 以下。如果該值超過 5000 ppm，則特別是在將本發明的聚醚改質聚矽氧組成物作為聚胺酯發泡體等的整泡劑使用的情況下，有時聚胺酯泡沫會污染所設置場所周圍的構件，或者引起電氣電子設備的接點故障。作為所述低分子矽氧烷，有環狀與直鏈狀，例如有用式 $[(CH_3)_2SiO]_n$ (式中，n 為 3 至 10 整數) 表示的環狀二甲基矽氧烷、以及用式 $CH_3[(CH_3)_2SiO]_mSi(CH_3)_3$ (式中，m 為 1 至 10 整數) 表示的直鏈狀二甲基矽氧烷低聚物，此外這些甲基的一部分可以利用其他有機基取代。作為所述低分子矽氧烷的更具體

的示例，可例舉出八甲基四矽氧烷、十甲基五環矽氧烷、兩末端三甲基矽氧基封端二甲基矽氧烷低聚物。所述低分子矽氧烷的含量例如能夠使用氣相色譜分析裝置進行分析來進行測定。減少低分子矽氧烷的方法並未被限定，但是為了在工業上藉由普通氣提操作來減少低分子矽氧烷，優選預先精製本發明的聚醚改質聚矽氧組成物的原料即有機氫聚矽氧烷，將低分子矽氧烷除去。或者，還可以在氫化矽烷化反應中、或者反應結束後除去低分子矽氧烷。

[製造方法]

【0074】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物優選藉由以下方法獲得成分(A)即聚醚改質聚矽氧，所述方法如下：使用所述通式(1'H)表示的有機氫聚矽氧烷、與用所述通式(2)：



(式中，x、t1、t2 及 t3 為與上述相同的數，Y 為與上述相同的定義， C_xH_{2x-1} 為具有碳碳雙鍵的直鏈狀或支鏈狀烯基)

表示的分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物發生氫化矽烷化反應。此時，開始、或進行氫化矽烷化反應的步驟可以在沒有溶劑的情況下進行，可以在存在所述(B)成分即單醇有機化合物的情況下進行，亦可以在存在與所述成分(B)不同的揮發性有機溶劑(B')的情況下進行。另外，如果在沒有溶劑或存在與成分(B)不同的揮發性有機溶劑(B')的情況下開始、或進行用於得

到成分(A)的氫化矽烷化反應，進而還需要添加(B)成分的步驟。

【0075】 氫化矽烷化反應用觸媒只要能夠促進氫化矽烷化反應，則並無特別限定。作為氫化矽烷化反應觸媒，目前已知有多種金屬及化合物，可從該等中適當選擇後用於本發明。作為氫化矽烷化反應觸媒的示例，具體而言，能夠例舉出吸附在二氧化矽微粉末或碳粉末載體上的微顆粒狀鉑、氯鉑酸、醇改質氯鉑酸、氯鉑酸的烯烴錯合物、氯鉑酸與乙炔基矽氧烷的配位化合物、鉑黑、鈦、以及銻觸媒。這些觸媒能夠利用常規方法溶解或分散到甲苯、觸媒的配位體化合物、醇類、其他適當的極性溶劑、反應原料即聚醚及不飽和化合物、稀釋劑等中後，投入到反應系中，更優選稀釋到本發明的成分(B)中後投入。觸媒的溶劑只在需要的情況下除去即可。

【0076】 氫化矽烷化反應用觸媒的用量為有效量，只要是可促進本發明的聚醚改質聚矽氧組成物的聚合反應的量即可，並無特別限定。具體而言，相對於用所述通式(1'H)表示的有機氫聚矽氧烷、與用所述通式(2)表示的分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物的和（將整體設為 100 質量%），該觸媒中的金屬原子按質量單元計為 0.1 至 300 ppm，優選鉑金屬原子為處於 1 至 100 ppm 範圍內的量。這是因為，如果氫化矽烷化反應用觸媒的含量低於上述範圍的下限，則附加反應可能會不充分，如果超過上述範圍的上限，則可能導致不經濟，而且可能會造成得到的本發明組成物著色等，對透明性造成不良影響。

【0077】 如上所述，從與成分(B)的相容性、作為整泡劑的有用性、以及聚醚改質聚矽氧組成物的穩定性的角度來看，本發明的成分(A)優選在

聚醚部分具有至少 1 個以上聚氧化丙烯單元，用通式(2)表示的聚醚化合物優選具有聚氧化丙烯單元。此外，優選相對於有機氫聚矽氧烷，原料即聚醚化合物中的烯基的物質質量與有機氫聚矽氧烷中的矽鍵合氫原子相比，以等量或過剩的量添加後，使其進行氫化矽烷化反應。具體而言，聚醚化合物中的烯基(R^{Vi})與有機氫聚矽氧烷中的矽鍵合氫原子(Si-H)的物質質量的比(摩爾比)為 $[R^{Vi}]/[Si-H]=1.0$ 至 5.00，優選為以 1.0 至 2.00 的量進行反應。另外，該反應後的組成物可以含有源自原料的未反應的聚醚化合物。

【0078】 氫化矽烷化反應的條件能夠根據有無原料及後述溶劑任意選擇，能夠少量添加生育酚(維他命 E)或 BHT(丁化羥基甲苯)等抗氧化劑，在氫氣等惰性氣體環境下以室溫至 200°C 加熱攪拌而得到，優選為以 70 至 150°C 加熱攪拌而得到。另外，抗氧化劑可以在氫化矽烷化結束後添加。反應時間能夠根據反應規模、觸媒用量及反應溫度進行選擇，通常為數分鐘至數小時的範圍。此外，反應可以以改善品質等為目的在減壓下進行，例如，日本特開平 11-116670 號公報中提出的反應條件等能夠適用而沒有特別限制。

【0079】 另外，能夠根據紅外分光法(IR)的 Si-H 鍵吸收消失、或者根據以下鹼分解氣體生成法中氫氣生成結束，確認氫化矽烷化反應結束。另外，利用該方法對反應原料即有機氫聚矽氧烷中的矽鍵合氫原子(Si-H)進行分析，從而還能夠確定氫氣生成量。

<鹼分解氣體生成法：在室溫下使將試料溶解到甲苯或 IPA 中得到的溶液、與 28.5 質量%苛性鉀的乙醇/水混合溶液發生反應，將所發生氫氣收集到採

樣管中，對其體積進行測定的方法>

【0080】 此外，只要不影響本發明的聚醚改質聚矽氧組成物的技術效果，出於抑制副反應等目的，能夠添加乙酸鉀、丙酸鉀、乙酸钠等羧酸鹼金屬鹽等緩衝劑。這些緩衝劑以固體（粉末）狀態直接添加到反應系中、溶解或分散到甲醇等極性溶劑及本發明的(B)成分中後再添加到反應系中、或者預先溶解到用通式(2)表示的分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物中，均能夠發揮效果。添加時機優選為氫化矽烷化反應（主反應）的開始前，但即使在主反應結束後添加，亦對抑制後步驟中及製造後的副反應具有一定程度的效果。用於溶解羧酸鹼金屬鹽等的極性溶劑可任意在主反應開始前、或結束後利用氣提操作除去。

[任意進行的精製/低臭化處理]

【0081】 進而，根據本發明的聚醚改質聚矽氧的用途，而要求對粗製品進行精製及低臭化的情況下，可以使用加氫、與酸性物質接觸、以及除去所生成醛類等眾所周知的精製方法。這些方法能夠從例如日本特開 2007-186557 號公報的段落 0031 等中提出的精製方法 1 及精製方法 2、日本特開 2000-327785 號公報等中提出的氣味減少方法、使用本專利申請人在日本特開 2011-116902 號公報中提出的酸性無機鹽的處理方法等中進行選擇，而沒有特別限制。特別是進行這些精製方法，從而能夠預先將從聚醚改質聚矽氧組成物中經時產生的有害醛類的量控制在最小，因此從低排放性（Low Emission）的角度出發，這些精製品有利，除了作為建築用材料、汽車工業（例如汽車內飾材料）、床及沙發等家具類、寢具、服裝等中使用

的聚胺酯發泡體的整泡劑有用外，還具有作為化妝料原料的有用性進一步得到改善的優點。

[沒有溶劑情況下的氫化矽烷化反應→添加成分(B)]

【0082】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物能夠藉由至少含有以下步驟的製造法適當製造：實質上在沒有溶劑的情況下開始所述有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化的步驟；以及在反應結束後或反應中添加所述成分(B)即單醇有機化合物進行稀釋或促進反應的步驟。亦能夠在沒有溶劑的情況下完成反應後添加成分(B)進行稀釋，還能夠在沒有溶劑的情況下在反應的中途階段添加成分(B)來完成反應。本製造方法原則上不需要氣提步驟。此外，本發明的聚醚改質聚矽氧作為整泡劑的性能優異，因此容易引起泡沫的穩定化。因此，如果在存在甲苯等溶劑的情況下進行反應，則為了去除甲苯等而進行減壓去除（氣提）後，所產生的泡沫不會破裂，而覆蓋到反應罐上部，因此有時工業生產上的週期增加而導致不利，但是在沒有溶劑的情況下開始反應，從而有時能夠消除所述工業生產上的問題。另外，在沒有溶劑的情況下開始反應，反應進展到一定程度後添加所述成分(B)即單醇有機化合物，從而能夠抑制附加反應造成的黏度上升，改善攪拌效率及反應性。

[存在成分(B)情況下的氫化矽烷化反應]

【0083】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物能夠藉由至少含有以下步驟的製造法適當製造：在存在所述成分(B)即單醇有機化合物的情況下開始

或進行所述有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化的步驟。本製造方法中，能夠同時存在成分(B)以外的溶劑或稀釋劑，但是在不存在的情況下則不需要氣提步驟。另一方面，同時存在成分(B)以外的溶劑或稀釋劑的情況下，只在反應結束後需要將其去除時，需要氣提步驟。該方法可減少上述製造步驟中發泡與工業生產效率惡化的問題，不使用成分(B)以外溶劑的情況下，無需進行溶劑交換等追加步驟，反應開始後所得到的組成物的黏度受到抑制，因此攪拌效率及反應效率優異，能夠顯著改善得到的聚醚改質聚矽氧組成物作為界面活性劑或整泡劑的品質及功能。

[存在不同的揮發性有機溶劑(B')情況下的氫化矽烷化反應→與成分(B)交換溶劑]

【0084】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物能夠藉由至少含有以下步驟的製造法適當製造：在存在與所述成分(B)不同的揮發性有機溶劑(B')的情況下開始或進行所述有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化的步驟；以及將與該成分(B)不同的揮發性有機溶劑(B')與所述成分(B)即單醇有機化合物進行溶劑交換的步驟。

【0085】 該方法中使用的揮發性有機溶劑(B')只要與所述成分(B)不同且沸點低於所述成分(B)，則並無特別限定，能夠使用沸點 60°C 以上且不到 200°C 的物質。例如，可例舉出乙醇、異丙醇、1-丁醇、叔丁醇、環己醇、環己酮、甲基乙基酮、甲基異丁基酮、異十二烷、甲苯、二甲苯、均三甲苯、1,4-二噁烷、二丁醚、苯甲醚、4-甲苯甲醚、乙苯、乙氧基苯、乙二醇

二甲醚、乙二醇二乙醚、2-甲氧基乙醇(乙二醇單甲醚)、二乙二醇二甲醚、二乙二醇單甲醚、1-甲氧基-2-丙基乙酸酯、1-乙氧基-2-丙基乙酸酯、八甲基環四矽氧烷、以及六甲基二矽氧烷等無鹵類溶劑、三氟甲苯、1,2-雙(三氟甲基)苯、1,3-雙(三氟甲基)苯、1,4-雙(三氟甲基)苯、三氟甲基氯苯、三氟甲基氟苯、氫氟醚等鹵素類溶劑。這些揮發性有機溶劑可單獨使用，亦可混合兩種以上使用。

【0086】 本發明的聚醚改質聚矽氧的合成反應結束，利用氣提等除去揮發性有機溶劑(B')後，能夠與成分(B)即單醇有機化合物進行溶劑交換。另外，使用甲苯等揮發性有機溶劑(B')的氫化矽烷化反應步驟中，有時源自聚合後的聚醚改質聚矽氧而在攪拌中產生的泡沫會得到穩定化，因此優選在工業生產過程中，對氣提時的減壓度、加熱溫度及攪拌速度進行適當控制。為了抑制氣提步驟中產生泡沫導致製造時間變長，能夠在預先減壓到一定程度的狀態下開始反應。

【0087】 此處，溶劑交換使用的方法並無特別限定，例如，使用甲苯等揮發性有機溶劑(B')的氫化矽烷化反應步驟中，可以依據日本特開平08-156143 號公報所記載的方法，使用旋轉式蒸發裝置等除去有機溶劑後，與成分(B)即單醇有機化合物進行溶劑交換。

【0088】 如上述所示，本發明所述的液狀聚醚改質聚矽氧能夠用多種方法製造。然而，從避免製造步驟中的起泡問題而提高生產步驟效率的角度來看，優選為實質上不含氣提步驟的製程。特別優選為在存在成分(B)的情況下開始氫化矽烷化反應的製程。

【0089】 特別是使用本發明的成分(B)，任意使用成分(C)，能夠以連

續氫化矽烷化製程進行本發明所述的液狀聚醚改質聚矽氧的合成反應。特別是存在成分(B)情況下的連續氫化矽烷化製程能夠適當適用於將聚矽氧烷聚合度及黏度較高的有機氫聚矽氧烷作為原料的聚醚改質聚矽氧組成物的合成，與分批製程同樣具有能夠以連續步驟大量且低成本生產品質、乳化及整泡性能優異的聚醚改質聚矽氧組成物的優點。

[本發明組成物的使用：界面活性劑等]

【0090】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物在分子內具有親水性互不相同的聚矽氧部位與聚醚部位，因此能夠用於過去眾所周知的聚醚改質聚矽氧的用途，而沒有特別限制，能夠用於界面活性劑、整泡劑、纖維的潤滑性賦予劑、其他高分子材料的反應性原料等，而沒有特別限制。此外，本發明的聚醚改質聚矽氧與上述作為分散介質的成分(B)即特定單醇有機化合物的相容性優異，作為整個組成物，工業生產性、方便性、配混穩定性、操作作業性、保存穩定性等品質方面優異，因此在過去從成本、操作作業性的角度來看無法使用的領域中，有時亦能夠更容易且大量使用。特別是本發明的聚醚改質聚矽氧組成物作為工業用或化妝品用的界面活性劑有用，其配混對象有塗料、鍍膜劑、建築材料、化妝料、親水性賦予劑、表面處理劑、發泡性樹脂組成物等，並無特別限制。此外，源自其作為界面活性劑的功能，特別是可用作塗料用添加劑、乳化劑、可溶化劑、聚胺酯發泡體用的整泡劑及化妝料原料。

[本發明組成物的使用：整泡劑]

【0091】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物在製造發泡性樹脂時，特別是製造聚胺酯發泡體時，能夠適當地作為氣泡控制或氣泡穩定用的界面活性劑使用，特別是作為整泡劑使用。特別是本發明所述的組成物不僅限於作為氣泡穩定劑，還能夠控制開孔率（控制泡沫的通氣性），預混液的均質性及穩定性優異，而且與泡沫形成用乳膠組成物中的各種成分的相溶性優異。進而，與日本特開平 08-156143 號公報等記載的(AB)_n 型聚醚-聚矽氧烷嵌段共聚物組成物同時使用，從而具有能夠兼顧微孔用途及慢回彈泡沫用途中的氣泡保持性與微細孔化的優點，即具有能夠兼顧氣泡保持性與泡沫低密度化的優點。此外，軟質泡沫的用途中，藉由調節本發明的成分(A)與成分(B)的配混比例，能夠對所希望的通氣性進行管理。硬質泡沫中，藉由調節本發明的成分(A)與成分(B)的配混比例，能夠對獨立氣泡率及孔尺寸進行管理。

【0092】 進而，本發明的聚醚改質聚矽氧組成物藉由使用分散介質即成分(B)，能夠選擇從矽氧烷聚合度小到矽氧烷聚合度大的合成反應時的任意有機氫聚矽氧烷原料，能夠容易地設計或調節作為聚醚改質聚矽氧的整體分子量及聚醚改質基的導入量。此外，亦能夠藉由聚醚部的 EO/PO%及尺寸、向聚醚改質基末端部導入羥基或疏水基，來對表面活性及與聚胺酯泡沫系統的親和性等進行控制。特別是由存在成分(B)情況下的氫化矽烷化反應得到的本發明的聚醚改質聚矽氧組成物除了通常反應較快外，還不需要高溫下的氣提步驟，因此能夠將對性能造成不良影響的副反應的進行控制在最小。因此，在包括要求設計將整泡劑分子量控制在非常小的高彈性泡沫(High Resilience Foam)、適用中等分子量整泡劑的硬質泡沫、以及要求

採用高分子量（原液黏度非常高）且穩定製造難度高的整泡劑的軟質泡沫或微孔泡沫在內的所有聚胺酯泡沫處方中，該改質聚矽氧作為氣泡控制或氣泡穩定用的界面活性劑能夠以較好的再現性穩定發揮優異效果。

【0093】 而且，本發明的聚醚改質聚矽氧組成物的製造步驟的選擇範圍較大，即使設計所希望的聚醚改質聚矽氧，亦不會引起製造步驟中發生的泡沫控制問題，或者該泡沫控制問題能夠輕易消除，因此生產性優異，能夠對與工業生產成本直接相關的製造上課題、以及用途上課題進行綜合解決，使包含新型聚醚改質聚矽氧組成物的整泡劑在市場上得到充分普及，並作為高性能原料進行利用。

[聚胺酯發泡體形成組成物]

【0094】 上述整泡劑可用於製造聚胺酯泡沫。因此，本發明的聚胺酯發泡體形成組成物只要含有上述整泡劑即本發明的聚醚改質聚矽氧組成物，則在其種類、特性、所適用處方的種類上沒有特別限制。

[泡沫種類]

【0095】 通常聚胺酯泡沫有硬質與軟質，具體而言，可大致分為軟質聚胺酯泡沫、高彈性聚胺酯泡沫、硬質聚胺酯泡沫、特殊泡沫。本發明的聚胺酯發泡體形成組成物的分子量設計、操作作業性（操作）等優異，因此在所有聚胺酯泡沫處方中，作為整泡劑能夠發揮優異的效果。

【0096】 軟質聚胺酯泡沫廣泛用於沙發及床的緩衝材料、汽車等的座位。軟質板狀泡沫的原料系的黏度較低，且發泡倍率高，因此孔成長時的

孔膜的穩定化為關鍵問題。該系非常適用分子量較高的整泡劑（聚醚改質聚矽氧）。此外，為確保與 3000 號多元醇的相溶性，廣泛應用對氧化丙烯比率較高的聚醚進行接枝改質的類型。改質聚醚的末端未封端（羥基）的類型具有可增強孔的獨立氣泡性的效果，因此廣泛應用聚醚末端已封端（多數為甲氧基封端）的類型，有利於孔膜連通化。本發明的聚醚改質聚矽氧組成物為較高分子量的界面活性劑，為含有上述單醇有機化合物的低排放性（Low Emission）或低霧化性（Low Fogging）類型的整泡劑，能夠適當地用於該系。另一方面，軟質熱模處方由與軟質板處方相當接近的聚胺酯原液系組成，其反應性快，且在模內被覆上膜，因此確保高通氣性很重要。本發明的聚醚改質聚矽氧組成物能夠實現高通氣性，能夠用於該處方。

【0097】 阻燃泡沫應對型整泡劑被定義為能夠減少處方中阻燃劑添加份數的類型、以及減少添加阻燃劑對泡沫物性所產生的不良影響的類型。但是通常聚矽氧整泡劑被定位為助燃劑。這是因為泡沫受熱熔融為液狀時，表面活性效果導致聚矽氧整泡劑集中在液面，而阻礙碳化的緣故。因此阻燃泡沫中，適合使用聚矽氧含有率較低且整泡活性低的整泡劑。可以將本發明的聚醚改質聚矽氧組成物作為阻燃泡沫應對型整泡劑使用。

【0098】 高彈性泡沫(HR Foam)主要為汽車座位等模發泡，因此要求提高成型性、通氣性。HR 泡沫由於系的黏度高、反應性快，因此孔膜的穩定化較容易，但連通化沒有進展，因此需要防止滯留在泡沫內部的氣體導致的開裂、脫模後的收縮等問題。因此，通常廣泛應用整泡能力非常弱、具有孔開放性的整泡劑。這種類型的設計將整泡劑的分子量控制得非常小，可達成初期的原料成分乳化，但是具有孔膜保持能力非常弱的特點。

【0099】 進而，該系中還應用了沒有對聚醚進行改質的較低分子量的二甲基聚矽氧烷。這些在與聚醚改質聚矽氧的組合中，能夠作為賦予穩定整泡活性（成型性）的整泡助劑而發揮作用，能夠藉由分子量分佈的最佳化來調節孔開放性及整泡能力的強弱。

【0100】 需要高活性的 TDI 基底液處方適合使用整泡能力及微孔化更強的類型，另一方面，獨立氣泡性較強的 MDI 基底液的處方適合使用整泡能力更弱、且可賦予良好破碎性及高通氣性的類型。此外，同時使用強整泡能力類型和弱整泡能力類型來調節孔尺寸及通氣性可廣泛應用於生產，是該系統特有的方法。

【0101】 但是，高彈性泡沫用途中通用的非常低分子量聚醚改質聚矽氧及低分子量二甲基聚矽氧烷存在製程範圍狹窄的課題（泡沫處方的自由度及容許範圍狹窄），為消除該課題，還能夠同時適量使用本發明的聚醚改質聚矽氧組成物。

【0102】 硬質聚胺酯泡沫重量輕，隔熱性優異，生產性高，因此被廣泛用於建材及冷藏庫等的隔熱材料。為提高硬質聚胺酯泡沫的隔熱性，盡可能將孔尺寸控制得較小很重要。最終得到的泡沫的孔數、與初期攪拌聚胺酯發泡液時所分散的攪入氣泡數基本一致。因此，初期攪拌中提高乳化能力的整泡劑最佳。另一方面，孔越小，泡沫越容易收縮。這種情況下，對整泡活性較低的類型進行配製，提高孔尺寸，從而防止收縮的效果提高。另外，阻燃性優異的聚異氰尿酸酯泡沫亦被分類為硬質聚胺酯泡沫的一種。

【0103】 硬質聚胺酯泡沫中，過去作為發泡劑使用的 HCFC141b 在地球環境保護方面受到限制，進而存在其替代品即 HFC 化合物在不遠的將

來受到限制的動向。發泡劑對聚胺酯泡沫處方造成的影響大，需要根據其種類選擇最佳的整泡劑。

【0104】 在水處方及水份數多的 HFC 處方中，和與聚胺酯原液系相容性良好的 HCFC-141b 處方相比，初期乳化能力低。因此對高整泡活性的整泡劑進行配製，從而有望得到良好的孔。此外，環戊烷處方中，從儲藏穩定性的角度來看，有些情況要求預混相容性。這種情況下，與基底液多元醇的相容性很重要，改質聚醚的 EO（氧化乙烯）比率高，且末端為羥基（-OH）的類型呈現出較良好的相容性。本發明的組成物不僅與使用 HFC 的聚胺酯泡沫形成性組成物的相容性優異，與使用環戊烷的聚胺酯泡沫形成性組成物的相容性亦優異，因此亦能夠配混於使用這些發泡劑的硬質聚胺酯泡沫處方或預混液中，作為有效的整泡劑發揮作用。而且，本發明的組成物為低排放性（Low Emission（或 Low VOC））類型的整泡劑，有望發揮減少或緩和致病屋問題的效果。

【0105】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物優選為由中等分子量到較高分子量的界面活性劑與特定單醇有機化合物組成的整泡劑，能夠根據要求調節乳化性、分子量及末端官能基，因此在水發泡的硬質聚胺酯泡沫中亦能夠配混，而並無特別限制。

【0106】 特殊泡沫例如可列舉出：軟質泡沫與硬質泡沫的中間材料即半硬質泡沫；從軟質泡沫中派生，但藉由獨特的黏彈性舉動而確立了特有用途與地位的低彈性泡沫；用於鞋底等，被稱為自結皮泡沫的高密度泡沫；以及用機械發泡(mechanical froth)法製造而成的微孔泡沫等。

【0107】 除此之外，作為聚胺酯泡沫的原料多元醇，沒有使用普通的

聚醚型多元醇，而是使用聚酯型多元醇製造而成的泡沫被稱為酯泡沫，這些亦具有滿足上述泡沫特性的分類。

【0108】 硬質泡沫在很多用途中隔熱性受到重視，因此通常需要高獨立氣泡率的閉合孔型的泡沫，但是在若干個用途中則重視尺寸穩定性，在選擇界面活性劑及調配泡沫組成物方面，設法使其部分開放孔化。相反地，普通軟質泡沫中，將處方設計為由於結構體強度因交聯進行而增強，從而造成多元醇與異氰酸酯之間反應引起的聚胺酯結構形成、以及反應熱及發泡劑導致的泡沫隆起中止的瞬間，使結構體內的所有孔（氣泡）膜破裂（開放）而連通化（連續通氣化）。

【0109】 低彈性泡沫的處方與普通軟質泡沫的處方類似，但設法在原料多元醇中加入具有黏彈性的結構要素。因此，孔連通化的難度變高，開放孔效果高的界面活性劑的重要性增加。進而，在利用 HR 及機械發泡法製造的高密度微孔泡沫的領域中，藉由對開孔率進行控制，從而誕生了各種用途。

【0110】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物是適合對這種開孔率進行控制的整泡劑，在利用機械發泡法製造的高密度微孔泡沫、其他硬質泡沫及軟質泡沫等領域中，不僅限於作為氣泡穩定劑，亦能夠對開孔率進行控制。

【0111】 優選本發明的聚胺酯發泡體形成組成物含有：

- (a) 多元醇、
- (b) 聚異氰酸酯、
- (c) 觸媒、

- (d) 含有申請專利範圍第 1 至 7 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物的整泡劑、以及
- (e) 從(d)成分以外的整泡劑、發泡劑、稀釋劑、鏈伸長劑、交聯劑、水、非水性發泡劑、填充劑、強化劑、顏料、染料、著色劑、阻燃劑、抗氧化劑、抗臭氧劑、紫外線穩定劑、防靜電劑、殺菌劑及抗菌劑所組成的群中任意選擇的至少一種添加成分。

【0112】 以下對各成分進行簡單說明。

[(a)多元醇]

【0113】 作為多元醇，例如可列舉出聚醚多元醇、聚酯多元醇等。作為聚醚多元醇，可以向多價醇、糖類、苯酚類、苯酚衍生物、芳香族胺等附加氧化烯而得到，例如可列舉出向丙三醇、丙二醇、二丙二醇、乙二醇、二乙二醇、三羥甲基丙烷、新戊四醇、蔗糖、山梨醇、酚醛清漆、壬基酚、雙酚 A、雙酚 F、甲苯二胺、二苯基甲烷二胺等 1 種或 2 種以上附加氧化烯而得到。作為聚酯多元醇，可列舉出利用己二酸、鄰苯二甲酸、琥珀酸等多官能羧酸與丙三醇、丙二醇、二丙二醇、乙二醇、二乙二醇、三羥甲基丙烷、新戊四醇等多官能羥基化合物之間的縮合聚合製造而成的末端具有羥基的多元醇。多元醇可單獨使用一種，亦可同時使用兩種以上。另外，從向聚胺酯泡沫賦予低排放性（Low Emission）特性的角度來看，多元醇中含有的添加劑（例如抗氧化劑及穩定劑）選擇沒有揮發性的高分子量類型很重要。

【0114】 適合調製本發明的聚胺酯發泡體的多元醇在每個分子中具

有 2 至 8 個羥基，而且具有 200 至 10,000 的數量平均分子量，優選為具有 500 至 7,500 的數量平均分子量。有用的聚醚多元醇的示例包括 Voranol220-028、Voranol220-094、Voranol225、Voranol270、Voranol490 及 Voranol800(Dow Chemical Company)的製品、以及 Arcol11-34(Bayer Material Science)等。

【0115】 多元醇、例如聚醚多元醇及聚酯多元醇通常具有約 15 至約 700 範圍內的羥基數（羥基價）。羥基數優選軟質泡沫中約 20 至 60，半軟質（或半硬質）泡沫中約 100 至 300，硬質泡沫中約 250 至 700。軟質泡沫中，優選官能價、即多元醇的每個多元醇分子的平均羥基數約 2 至 4，最優選為約 2.3 至約 3.5。硬質泡沫中，優選官能價約 2 至約 8，最優選為約 3 至約 5。

【0116】 作為適合幾乎所有聚胺酯泡沫的整泡劑，能夠使用本發明的整泡劑。其配混量為，相對於多元醇 100 質量份，聚醚改質聚矽氧組成物中的(A)聚醚改質聚矽氧處於 0.3 至 8.0 質量份的範圍，優選為 0.5 至 4.0 質量份的範圍，更優選為 1.0 至 2.0 質量份。

[(b)聚異氰酸酯]

【0117】 作為聚異氰酸酯，可使用作為有機聚異氰酸酯而眾所周知的所有物質，最普通的為甲苯二異氰酸酯（以下簡稱為「TDI」）及二苯基甲烷二異氰酸酯（以下簡稱為「MDI」）。TDI 能夠混合同分異構物，即不僅能夠使用 2,4-體 100%品、2,4-體/2,6-體為 80/20 或 65/35（分別為質量比）等，亦能夠使用含有多官能性焦油的粗 TDI。作為 MDI，除了能夠使用以 4,4'-

二苯基甲烷二異氰酸酯作為主成分的純品外，還能夠使用含有 3 核體以上多核體的聚合 MDI。

【0118】 這些異氰酸酯化合物中，若要製造硬質聚胺酯泡沫通常使用 MDI，若要製造軟質聚胺酯泡沫通常使用 TDI。

【0119】 MDI 的異氰酸酯預聚物藉由 MDI 與多元醇之間的反應、以及與被脲酮亞胺(uretonimine)修飾的修飾體及上述 MDI 衍生物之間的任意比例的組合製作而成。同樣地優選為甲苯二異氰酸酯(TDI)，包含：藉由 2,4 及 2,6 同分異構物以及 TDI 與多元醇之間的反應製作而成的 TDI 的異氰酸酯預聚物，以及含有其他芳香族或脂肪族聚異氰酸酯及脲酮亞胺修飾的聚異氰酸酯、與它們的預聚物在內的它們修飾體。聚異氰酸酯的混合物當然在本發明的範圍內。

【0120】 聚異氰酸酯相對於處方中其他材料量的配混量藉由「異氰酸酯指數」表示。「異氰酸酯指數」是異氰酸酯實際用量除以與反應混合物中全部活性氫進行反應所需要的聚異氰酸酯的化學計算量後乘以 100 的值。本發明的方法中使用的聚胺酯泡沫形成組成物的異氰酸酯指數通常為 60 至 140。通常異氰酸酯指數在軟質 TDI 泡沫中一般為 85 至 120，在高彈性(HR)泡沫即模具 TDI 泡沫中通常為 90 至 105，在模具 MDI 泡沫中大約為 70 至 90，在硬質 MDI 泡沫中一般為 90 至 130。聚異氰尿酸酯硬質泡沫的若干個示例中，以 250 至 400 的高指數製造而成。

[(c)觸媒]

【0121】 包含：乙醯丙酮鎳、乙醯丙酮鐵、錫類觸媒、鈹類觸媒、鋅

類觸媒、鈦類觸媒、鋁錯合物、銦錯合物、辛酸鉀、乙酸鉀、乙酸鈉、辛酸鈉、表面具有固體酸點的金屬氧化物顆粒、三乙烯二胺、雙（二甲基胺基乙基）醚等叔胺聚胺酯觸媒、咪唑衍生物、羧酸季胺鹽、遲效性叔胺觸媒、普通型叔胺觸媒、低排放叔胺觸媒、無排放叔胺觸媒、以及例如來自 Air Products 的 DABCO（註冊商標）觸媒。

【0122】 這些觸媒中，若要製造硬質聚胺酯泡沫則優選為胺類觸媒，若要製造軟質聚胺酯泡沫則優選為同時使用胺類觸媒與錫類觸媒。

[(d)含有本發明的聚醚改質聚矽氧組成物的整泡劑]

【0123】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物如上所述，但是通常與整泡劑即具有聚醚部分的聚矽氧類、發泡樹脂種類的適應性有相關關係，從適用低分子量整泡劑的泡沫到適用高分子量整泡劑的泡沫按順序排列後如下：

高彈性泡沫<硬質泡沫<軟質泡沫<微孔泡沫。

【0124】 而且，整泡劑分子中的聚醚部分的結構亦對泡沫尺寸等造成巨大影響，因此存在擴大聚醚部分分子量分佈等的方法，例如，想要縮小孔尺寸來降低通氣性的情況下選擇高 EO 含量的聚醚結構，想要保持氣泡且使氣泡穩定化的情況下選擇大分子量的聚醚或者擴大製程範圍，為了對廣大用途及處方具有適應性而將分子量及結構不同的多個聚醚用作原料等，亦能夠適用於本發明的聚醚改質聚矽氧組成物。此外，很多情況下優選為聚胺酯的主原料之一即多元醇具有 PPG 結構部，從泡沫處方中的相溶性的

角度來看，聚醚改質聚矽氧中的聚醚部分中亦含有 PO（氧化丙烯）鏈。

【0125】 這些要求根據配混本發明的聚醚改質聚矽氧組成物的聚胺酯發泡體的種類而不同，但是能夠適當調節用所述通式(2)表示的有機氫聚矽氧烷、以及用所述通式(3)表示的兩末端含烯基聚醚的種類及反應比率等，或者亦能夠藉由聚醚部的 EO/PO%及尺寸、向共聚物末端部導入羥基或疏水基，來對界面活性及與聚胺酯泡沫系統的親和性等進行控制，因此具有能夠根據要求自由設計合適的整泡劑的優點。

[(e)任意成分]

【0126】 聚胺酯泡沫形成組成物中任意選擇的成分(e)中特別重要的是水及非水性發泡劑。水與聚異氰酸酯反應後生成二氧化碳氣體，從而作為化學發泡劑發揮作用。除此之外，還能夠在反應混合物中含有物理及/或化學型的一種或者一種以上的非水性發泡劑。此外，有些處方還可能不使用水。這些發泡劑能夠含有 HFC-245fa 及 HFC-134a 等氫氟烴類、HFO 及 HCFO 等氫氟烯烴類、以及 iso-、cyclo-及正戊烷等低沸點烴、超臨界二氧化碳、蟻酸等。

【0127】 在軟質泡沫與硬質泡沫中，水均作為反應性發泡劑得到大量使用。軟質板狀泡沫的製造過程中，水通常能夠在例如多元醇 100 份中以 2 至 6.5 份的濃度使用，通常為 3.5 至 5.5 份。高彈性(HR)泡沫中 TDI 模具泡沫中的水分量通常例如為 3 至 4.5 份。MDI 模具泡沫中，水分量通常例如為 2.5 至 5 份。另一方面，硬質泡沫的水分量例如為 0.5 至 5 份，通常為 0.5 至 1 份。將揮發性烴或鹵化烴等非反應性氣體作為基礎的發泡劑等物理發

泡劑亦能夠用於製造本發明的聚胺酯發泡體。所製造的硬質隔熱泡沫中，以適當比率用揮發性烴或鹵化烴進行發泡，優選發泡劑為氫氯氟烴(HCFC)及揮發性烴即戊烷與環戊烷。亦能夠使用氫氟烯烴(HFO、HCFO)。軟質板狀泡沫的製造過程中，水為主要發泡劑，但是作為輔助發泡劑亦能夠使用其他發泡劑。軟質板狀泡沫中，優選的輔助發泡劑為二氧化碳及二氯甲烷。高彈性(HR)泡沫通常不使用惰性的輔助性發泡劑，無論哪種的輔助發泡劑的配混量均少於板狀泡沫。但是，若干模具技術中，使用二氧化碳最重要。發泡劑的量根據所要求的泡沫密度及泡沫硬度而不同。使用烴型發泡劑時的量例如為微量或者每多元醇 100 份為 50 份，CO₂ 例如為約 1 至約 10%。

【0128】 但是，特別是在微孔用途中，藉由作為發泡劑使用水、氫氟烴類、低沸點烴等的化學發泡製造而成的聚胺酯泡沫中，硬度過低，難以達到最終製品所要求的尺寸精度，拉伸強度及耐磨性等機械強度亦不充分，因此通常藉由機械發泡製造高密度泡沫。即，此處藉由機械攪拌而攪入的空氣或氮氣等主要構成氣泡的核。

【0129】 此處，聚胺酯泡沫形成組成物中能夠含有的多元醇 a)、聚異氰酸酯 b)、觸媒 c)、本發明的聚醚改質聚矽氧組成物 d)、任意成分 e)即水、非水類發泡劑、其他成分例如能夠在以下所示的較寬範圍內變化。容許較寬範圍的理由在於必須根據所要求的泡沫特性、用途、發泡形式、裝置等來對聚胺酯泡沫形成組成物的處方進行調節。

【0130】 聚胺酯泡沫形成組成物的組成範圍的示例：

6 至 85 質量份的多元醇 a)、10 至 80 質量份的聚異氰酸酯 b)、0.01 至 5.0 質量份的觸媒 c)、0.1 至 20 質量份的本發明的聚醚改質聚矽氧組成物 d)、

以及作為任意成分的水 0 至 9 質量份、非水性發泡劑 0 至 45 質量份。

【0131】 進而，所述聚胺酯泡沫形成組成物中能夠含有的水的質量優選為相對於所述多元醇的質量處於相當於 0 至 10% 的範圍內。

【0132】 其他的任意選擇成分 e) 可以在通常的含量範圍內含有其他聚合物及/或共聚物、稀釋劑、鏈伸長劑、交聯劑、充填劑、強化劑、顏料、染料、著色劑、阻燃劑、抗氧化劑、抗臭氧劑、紫外線穩定劑、防靜電劑、殺菌劑及抗菌劑等該領域中眾所周知的任意成分。從賦予低排放性 (Low Emission) 特性的角度來看，即使採用這些任意成分，亦要確認材料是只由不會因從泡沫中遷移及揮發而引起釋放的成分構成的材料後，再配混到泡沫處方中，這在聚胺酯泡沫形成性組成物的處方設計上很重要。

【0133】 例如，作為任意選擇的成分 e)，能夠含有作為交聯劑或鏈伸長劑發揮作用的每個分子中具有 2 至 8 個羥基與 62 至 500 分子量的聚羥基末端化合物。具有 3 至 8 個羥基的交聯劑包含丙三醇、三羥甲基丙烷、新戊四醇、甘露醇、山梨醇等。具有兩個羥基的有用的鏈伸長劑的示例包含二丙二醇、三丙二醇、丙二醇、二乙二醇、三乙二醇、1,4-丁二醇、乙二醇、2,3-丁二醇、2-甲基-1,3-丙烷二醇、1,2-丙烷二醇、1,3-丙烷二醇及新戊二醇等。亦能夠使用二乙醇胺及單乙醇胺等。

【0134】 任意選擇的成分 e) 此外還可以含有例如無機充填劑或充填劑的組合等充填劑。充填劑包含：擁有密度改質、機械性能或吸音等物理性能、阻燃性或例如碳酸鈣等改善後經濟性的用於優點改善的充填劑；減少發泡體製造成本的其他充填劑；氫氧化鋁或其他阻燃性充填劑；用於吸音的硫酸鋇或其他高密度充填劑；以及進一步減少發泡體密度的玻璃或聚

合物等物質的微球體。用於改善發泡體剛性或彎曲性模數等機械性能的高縱橫比的充填劑或強化劑包括：粉碎玻璃纖維或石墨纖維等人工纖維；矽灰石等天然礦物纖維；羊毛等天然動物或棉等植物纖維；粉碎玻璃等人工板狀纖維；以及雲母等天然礦物板狀充填劑。還包含能夠添加的任意的顏料、染料、著色劑。進而，本發明計劃使用：有機阻燃劑、抗臭氧劑、抗氧化劑；以及熱分解或熱氧化分解抑制劑、紫外線穩定劑、紫外線吸收劑、或者避免或抑制添加到發泡體形成組成物時發泡體產生熱、光及/或化學分解的任意其他添加劑。計劃在此處使用的還有任意的眾所周知的過去使用的防靜電劑、殺菌劑、抗菌劑及氣體褪色抑制劑。

【0135】 由本發明的聚胺酯發泡體形成組成物得到的聚胺酯發泡體優選為硬質泡沫、半硬質泡沫、高彈性泡沫(HR Foam)、軟質泡沫、或微孔泡沫。

【0136】 關於由本發明的聚胺酯發泡體形成組成物製造聚胺酯發泡體的製程，能夠利用現有的各種製造步驟。例如，如果是軟質泡沫，則能夠使用一次發泡法、準預聚物法及預聚物法來製造聚胺酯發泡體。普通軟質泡沫作為通常板狀泡沫進行工業生產。某種板狀泡沫可將反應體混合物注入大型箱體內製造而成（被稱為箱體泡沫的不連續法），但通常的塊狀泡沫將反應混合物噴到帶紙襯片的傳送帶上連續製造而成。隨著傳送帶的前進，泡沫發泡並硬化，運出發泡機時，泡沫被裁斷為大塊。

【0137】 此外，如果為硬質泡沫，則根據目的及用途，採用更加細分化的製造法。例如，被稱為「噴霧泡沫」的則採用在建築現場等現場對聚胺酯泡沫形成組成物進行噴霧發泡使其凝固的方式。被稱為「層壓板」的

則主要作為預製建築的隔熱材料使用，有時亦被稱為「隔熱板」、或「連續層壓板塊」等。層壓板的製造過程中，藉由輥子被連續供應到上下相對的面材之間進行發泡的泡沫形成組成物邊流動邊逐漸硬化，最終得到厚度 10 cm 左右的板狀發泡體。被稱為「器具(appliance)」的則為冷藏庫用隔熱材料的專用泡沫，藉由注入成型法在工廠內以全自動製程生產。但是，這種情況將泡沫形成組成物注入模具後進行發泡並使其硬化即結束，不會將發泡體從模具中取出。冷藏庫用泡沫在處方上的特徵在於，由於重視隔熱性而沒有將水用作發泡劑（二氧化碳具有易傳熱性質的緣故）。被稱為「現場注入」的則如字面意思，是在現場將泡沫形成組成物注入模具進行發泡並使其硬化後即結束的方式，指冷藏庫用途以外。

【0138】 特殊泡沫之一即「微孔」中，藉由被稱為機械發泡(mechanical froth)系統的機械發泡方式製造均質且微細的高密度泡沫。此處不使用所謂發泡劑，藉由機械攪拌而攪入的空氣或氮氣等主要構成氣泡的核。

【0139】 特殊泡沫或軟質泡沫之一即低彈性泡沫利用與普通軟質泡沫或 HR 泡沫相同的板狀或模具形式製造而成。板狀品將混合原液倒在連續傳送帶上，通常寬度 1 至 2m、高度 0.2 至 0.6m 的剖面被連續發泡為矩形或魚糕狀後，裁斷為指定長度（多數為 1 至 2m）的長麵包形狀。能夠以這種形狀被出貨到加工事業所，從板狀品中切出並加工出各種形狀的製品。模具品將原液注入塑膠或金屬製模子（模具）中進行發泡後，從模子中取出，即使是複雜形狀的製品，亦能夠以高尺寸精度大量成型。

【0140】 除此之外，個別的聚胺酯泡沫的製造方法能夠適當選擇，特別是本發明的聚醚改質聚矽氧組成物在以下日本特許公開公報或日本特許

公表公報的詳細說明、特別是實施例等所記載的聚胺酯泡沫的製造法中，能夠置換矽類整泡劑或矽界面活性劑、矽共聚物界面活性劑，而合適地使用。另外，這些詳細說明或實施例的公開包括與製造裝置相關的公開，還可以利用本行業技術人員的通常的設計更改進一步置換成分的一部分，根據黏度等的變化，適當更改其製造條件。

- 日本特表 2005-534770 號公報、日本特表 2005-534770 號公報、日本特表 2010-535931 號公報所記載的聚胺酯發泡體的製造方法；
- 日本特表 2010-539280 號公報所記載的開放孔聚胺酯的製造製程
- 日本特開 2012-246397 號公報、日本特開 2009-265425 號公報等所記載的包含聚胺酯泡沫的密封材料
- 日本特開 2012-082273 號公報、日本特開 2010-247532 號公報、日本特開 2010-195870 號公報、日本特開 2002-137234 號公報等所記載的聚胺酯泡沫的製造

【0141】 將本發明的聚醚改質聚矽氧組成物用於上述日本特許公開公報等的製造方法得到的聚胺酯泡沫包括在本發明的範圍內。進而，毫無疑問，使用本發明的聚醚改質聚矽氧組成物的聚胺酯發泡體的發明範圍並不限定於這些。

[化妝料原料及化妝料]

【0142】 本發明的聚醚改質聚矽氧組成物作為化妝料原料有用，進而，如上述所示，在工業生產步驟中能夠以較低成本生產，具有能夠以高附加值且低價格供應的優點。

【0143】 此外，本發明還涉及含有所述聚醚改質聚矽氧組成物的化妝料。作為所述化妝料，能夠列舉出含有眾所周知的聚醚改質聚矽氧、丙三醇改質聚矽氧或聚醚改質聚矽氧的化妝料、以及與其記載化妝料原料成分相同的成分的組合及用途。

【0144】 更具體而言，可列舉出含有本發明所述聚醚改質聚矽氧組成物的皮膚化妝料或毛髮化妝料。

【0145】 本發明所述的皮膚化妝料只要含有本發明所述的聚醚改質聚矽氧組成物，其形態則並無特別限定，可以為溶液狀、乳霜狀、固體狀、半固體狀、凝膠狀、油包水型或水包油型的乳化組成物（乳膠組成物）的任意一種。具體而言，本發明所述的皮膚化妝料可列舉出化妝水、乳液、乳霜、防曬乳液、防曬乳霜、手霜、卸妝、按摩材料、清洗劑、止汗劑、除臭劑等基礎化妝品；以及粉底、化妝打底、腮紅、口紅、眼影、眼線筆、睫毛液、指甲油等化妝用化妝品等。

【0146】 同樣地，本發明所述的毛髮化妝料只要含有本發明所述的聚醚改質聚矽氧組成物，則能夠以各種形態使用。例如，可以將其溶解或分散到醇類、烴類、揮發性環狀矽類等中使用，亦能夠進一步使用乳化劑，使其分散到水中後，以乳膠形態使用。此外，亦能夠同時使用丙烷、丁烷、三氯單氟甲烷、二氯二氟甲烷、二氯四氟乙烷、二氧化碳、氮氣等噴霧劑，作為噴霧使用。能夠以這些形態作為洗髮劑、護髮劑、捲髮劑、頭髮噴霧劑、燙髮劑、摩絲劑、染髮劑等使用。

【0147】 本發明的化妝料能夠任意添加普通化妝料中使用的成分、水、粉體或著色劑、醇類、水溶性高分子、皮膜形成劑、油劑、油溶性凝

膠化劑、有機改質黏土礦物、界面活性劑、樹脂、紫外線吸收劑、保濕劑、防腐劑、抗菌劑、香料、鹽類、抗氧化劑、pH 調節劑、螯合劑、清涼劑、抗炎症劑、美肌用成分（美白劑、細胞賦活劑、肌膚粗糙改善劑、血液循環促進劑、皮膚收斂劑、抗脂漏劑等）、維他命類、氨基酸類、核酸、荷爾蒙、包接化合物等、生理活性物質、香料，能夠在配混過去眾所周知的聚醚改質聚矽氧、丙三醇改質聚矽氧、糖改質聚矽氧、聚醚改質聚矽氧等的化妝料的各種處方中置換本發明所述的聚醚改質聚矽氧組成物後使用。這些並無特別限定。另外，能夠添加到本發明的化妝料中的各種成分及能夠利用的處方例的詳情可參照專利文獻 11(國際公開 WO2011/049248 號公報)的記載。

[先前專利已公開的處方]

【0148】 本發明所述的聚醚改質聚矽氧組成物能夠用於各種外用劑、化妝料。作為其具體的處方例，申請人等將專利文獻 11（國際公開 WO2011/049248 號公報）所記載實施例等中公開的各種化妝料及外用劑處方例中的相當於矽類界面活性劑的適當成分用上述本發明所述的聚醚改質聚矽氧組成物置換後，作為本專利發明所述的化妝料及外用劑的處方例，亦包含在本專利發明的範圍內。毫無疑問，本發明所述的化妝料及外用劑的處方例並不限定於此，將含有過去眾所周知的矽類界面活性劑（聚醚改質聚矽氧、丙三醇改質聚矽氧或聚醚-聚矽氧烷嵌段共聚物）的化妝料的矽類界面活性劑用本發明所述的聚醚改質聚矽氧組成物置換後，作為本專利發明所述的化妝料及外用劑的處方例，亦包含在本專利發明的範圍內。

【實施例】

【0149】 以下根據實施例與比較例對本發明更加詳細地進行說明，但本發明並不限定於此。另外，下述組成式中，Me 為甲基，將 Me_3SiO 基（或 Me_3Si 基）記為「M」，將 Me_2SiO 基記為「D」，將 Me_2HSiO 基記為「M^H」，將 MeHSiO 基記為「D^H」，將 M 及 D 中的甲基經過某個取代基改質後的單元記為 M* 及 D* 等。此外，IPA 為異丙醇。

<實施例 1-1> 能夠用於硬質及軟質泡沫兩者的界面活性劑

【0150】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $\text{MD}_{43.3}\text{D}^{\text{H}}_{6.7}\text{M}$ 表示的含 SiH 基有機聚矽氧烷 43.78g、用平均組成式 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{24}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_6-\text{CH}_3$ 表示的單側末端丙烯基聚醚 184.22g、二丙二醇單丁醚(BuDPG)10 g，在流通氮氣的情況下邊攪拌邊加溫到 93 至 98°C。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯基/SiH 的物質比為 1.567。添加鉑-2,4,6,8-四甲基-2,4,6,8-四乙基四矽氧烷錯合物的 BuDPG 溶液(Pt 濃度 0.01wt%)2.0g 後，35 分鐘後反應液變得透明化。進行了合計 2.5 小時的反應。接著採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法確認後，發現反應已結束。

由此，得到以 67.2 : 27.8 : 5 的比率含有用平均組成式 $\text{MD}_{43.3}\text{D}^*\text{M}$ (此處，* = $-\text{C}_3\text{H}_6\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{24}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_6-\text{CH}_3$) 表示的聚醚改質聚矽氧、未反應聚醚及 BuDPG 的透明均勻的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。此處聚醚部分為氧化乙烯與氧化丙烯的隨機加合物。(收穫量 235g)

<實施例 1-2>能夠用於硬質及軟質泡沫兩者的界面活性劑

【0151】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $MD_{43.3}D^H_{6.7}M$ 表示的含 SiH 基有機聚矽氧烷 40.8g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{24}(C_3H_6O)_6-CH_3$ 表示的單側末端丙烯基聚醚 171.7g、二丙二醇單丁醚(BuDPG)35 g，在流通氮氣的情況下邊攪拌邊加溫到 92°C。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯基/SiH 的物質比為 1.567。添加鉑-2,4,6,8-四甲基-2,4,6,8-四乙炔基四矽氧烷錯合物的 BuDPG 溶液(Pt 濃度 0.02wt%)2.5g 後，30 分鐘後反應液變得透明化。進行了合計 2.5 小時的反應。接著採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法確認後，發現反應已結束。

【0152】 由此，得到以 60 : 25 : 15 的比率含有用平均組成式 $MD_{43.3}D^*_{6.7}M$ (此處，*= $-C_3H_6O(C_2H_4O)_{24}(C_3H_6O)_6-CH_3$)表示的聚醚改質聚矽氧、未反應聚醚及 BuDPG 的透明均勻的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。此處聚醚部分為氧化乙烯與氧化丙烯的隨機加合物。(收穫量 242g)

<實施例 1-3>能夠用於硬質及軟質泡沫兩者的界面活性劑

【0153】 稱取上述實施例 1-2 中得到的聚醚改質聚矽氧組成物 25.0g 放入 35 mL 玻璃瓶中，添加二丙二醇單丁醚(BuDPG)3.3 g，塞上塞子充分搖晃混合，從而得到以 53 : 22 : 25 的比率含有用平均組成式 $MD_{43.3}D^*_{6.7}M$ (此處，*= $-C_3H_6O(C_2H_4O)_{24}(C_3H_6O)_6-CH_3$)表示的聚醚改質聚矽氧、未反應聚醚及 BuDPG 的透明均勻的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。

<實施例 2-1>軟質泡沫用的界面活性劑

【0154】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $MD_{78}D^H_{5.0}M$ 表示的含 SiH 基有機聚矽氧烷 50.6g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{22}(C_3H_6O)_{22}-H$ 表示的單側末端丙烯酸基聚醚 153.4g、二丙二醇單丁醚(BuDPG)34 g，在流通氫氣的情況下邊攪拌邊加溫到 90°C。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯酸/SiH 的物質比為 1.64。添加鉑-2,4,6,8-四甲基-2,4,6,8-四乙炔基四矽氧烷錯合物的 BuDPG 溶液(Pt 濃度 0.02wt%)2.0g 後，在 1 小時以內反應液變得透明化。進行合計 3 小時的反應，採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法確認反應結束。

【0155】 由此，得到以 60 : 25 : 15 的比率含有用平均組成式 $MD_{78}D^*_5.0M$ (此處，*= $-C_3H_6O(C_2H_4O)_{22}(C_3H_6O)_{22}-H$)表示的聚醚改質聚矽氧、未反應聚醚及 BuDPG 的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。此處聚醚部分為氧化乙烯與氧化丙烯的隨機加合物。

<實施例 3-1>軟質泡沫用的界面活性劑

【0156】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $MD_{78}D^H_{5.0}M$ 表示的含 SiH 基有機聚矽氧烷 50.6g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{12}(C_3H_6O)_{16}-CH_3$ 表示的單側末端丙烯酸基聚醚 65.4g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{25}(C_3H_6O)_{37}-CH_3$ 表示的單側末端丙烯酸基聚醚 65.3g、二丙二醇單丁醚(BuDPG)58 g，在流通氫氣的情況下邊攪拌邊加溫到 90°C。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯酸/SiH 的物質比為

1.58。添加鉑-2,4,6,8-四甲基-2,4,6,8-四乙炔基四矽氧烷錯合物的 BuDPG 溶液(Pt 濃度 0.01wt%)2.0g 後，在 1 小時以內反應液變得透明化。進行合計 3 小時的反應，採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法確認反應結束。

【0157】 由此，得到以 55：20：25 的比率含有用平均組成式 $MD_{78}D^{*}_{3.4}D^{**}_{1.6}M$ (此處， $*=-C_3H_6O(C_2H_4O)_{12}(C_3H_6O)_{16}-CH_3$ ， $**=-C_3H_6O(C_2H_4O)_{25}(C_3H_6O)_{37}-CH_3$) 表示的聚醚改質聚矽氧、未反應聚醚及 BuDPG 的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。此處聚醚部分為氧化乙烯與氧化丙烯的隨機加合物。

<實施例 4-1>軟質泡沫用的界面活性劑

【0158】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $MD_{171}D^H_{19}M$ 表示的含 SiH 基有機聚矽氧烷 48.0g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{12}-H$ 表示的單側末端丙烯基聚醚 (1)6.7g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{12}(C_3H_6O)_{16}-(CO)CH_3$ 表示的單側末端丙烯基聚醚 (2)78.9g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{25}(C_3H_6O)_{37}-(CO)CH_3$ 表示的單側末端丙烯基聚醚(3)78.9g、二丙二醇單丁醚(BuDPG)37.5 g，在流通氮氣的情況下攪拌加溫到 95°C。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯基/SiH 的物質比為 1.31。添加鉑-2,4,6,8-四甲基-2,4,6,8-四乙炔基四矽氧烷錯合物觸媒液(Pt 濃度 24.7wt%)9 μ l (相當於 0.01g) 後，10 分鐘後反應液變為半透明。在這種狀態下進行了 2.5 小時的熟化後，採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法進行確認後，轉化率為 75%，反應尚未結束。於是，升溫到 125°C，進一步進行了 2 小時的熟化後，結果內容液變為透明液體，轉化率

達到 90%。為了使反應結束，在反應系中追加 BuDPG 25g、所述丙烯酸基聚醚(2)及(3)各 14.4 g，進一步追加所述觸媒液 9 μl (相當於 0.01g)，以 125 $^{\circ}\text{C}$ 繼續反應 5 小時後，結果反應結束。最終的丙烯酸/SiH 的物質比為 1.52。另外，內容液為褐色透明液體，可觀察到只有非常微量的褐色的鉑觸媒凝集物 (凝膠狀) 附著在攪拌棒上。

【0159】 對此進行過濾後，得到以 49.3 : 25.7 : 25 的比率含有平均組成式 $\text{MD}_{171}\text{D}^{*}_{10.9}\text{D}^{**}_{5.1}\text{D}^{***}_{3}\text{M}$ (此處，
 $*$ = $-\text{C}_3\text{H}_6\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{12}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_{16}-(\text{CO})\text{CH}_3$ ，
 $**$ = $-\text{C}_3\text{H}_6\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{25}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_{37}-(\text{CO})\text{CH}_3$ ， $***$ = $-\text{C}_3\text{H}_6\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{12}-\text{H}$ 表示的聚醚改質聚矽氧、未反應聚醚及 BuDPG 的透明均勻的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。此處聚醚部分為氧化乙烯與氧化丙烯的隨機加合物。

<比較例 1-1> 能夠用於硬質及軟質泡沫兩者的界面活性劑

【0160】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $\text{MD}_{43.3}\text{D}^{\text{H}}_{6.7}\text{M}$ 表示的含 SiH 基有機聚矽氧烷 43.50g、用平均組成式 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{24}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_6-\text{CH}_3$ 表示的單側末端丙烯酸基聚醚 183.09g、甲苯 44.3 g，在流通氮氣的情況下邊攪拌邊加溫到 75 $^{\circ}\text{C}$ 。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯酸/SiH 的物質比為 1.567。添加氯鉑酸的 5% IPA 溶液(Pt 濃度 1.9wt%)200 ppm，進行了 2 小時的反應。接著採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法確認後，發現反應已結束。添加 550 ppm 的碳酸氫鈉進行中和後，對反應系逐漸減壓，進而將其加熱到 125 $^{\circ}\text{C}$ ，注意起泡所引起的突沸，並將甲苯逐漸餾出。甲苯餾出停止，在 40 hPa 以下保持 1

小時後，將反應系冷卻到 70°C，進行復壓並添加 28.9g 的所述單側末端丙烯基聚醚（稀釋用），使其混合均質化。進而，藉由使用矽藻土的過濾操作進行了固液分離。

【0161】 由此，得到以 62.8 : 37.2 的比率含有用平均組成式 $MD_{43.3}D^{*}_{6.7}M$ (此處， $*$ = $-C_3H_6O(C_2H_4O)_{24}(C_3H_6O)_6-CH_3$) 表示的聚醚改質聚矽氧及未反應聚醚的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。此處聚醚部分為氧化乙烯與氧化丙烯的隨機加合物。(收穫量 230g)

<比較例 1-2>

【0162】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $MD_{43.3}D^H_{6.7}M$ 表示的含 SiH 基有機聚矽氧烷 49.0g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{24}(C_3H_6O)_6-CH_3$ 表示的單側末端丙烯基聚醚 206.0g、二乙二醇單丁醚(BuDEG)45 g，在流通氮氣的情況下邊攪拌邊加溫到 80°C。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯基/SiH 的物質比為 1.567。添加鉑-2,4,6,8-四甲基-2,4,6,8-四乙炔基四矽氧烷錯合物觸媒液(Pt 濃度 24.7wt%)10 μ l (相當於 0.012g)，加溫到 90°C 至 100°C 後，40 分鐘後反應液大致變得透明化。進行了合計 2.5 小時的反應。接著採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法確認後，發現反應已結束。但是，可觀察到相當量（體積換算為 1 至 2 cm^3 左右）的褐色的鉑觸媒凝集物（凝膠狀）附著在攪拌棒上，且凝膠顆粒大量懸浮在內容液中。

【0163】 對此進行過濾後，得到以 60 : 25 : 15 的比率含有用平均組成式 $MD_{43.3}D^{*}_{6.7}M$ (此處， $*$ = $-C_3H_6O(C_2H_4O)_{24}(C_3H_6O)_6-CH_3$) 表示的聚醚改質

聚矽氧、未反應聚醚及 BuDEG 的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。此處聚醚部分為氧化乙烯與氧化丙烯的隨機加合物。

<比較例 1-3>

【0164】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $MD_{43.3}D^H_{6.7}M$ 表示的含 SiH 基有機聚矽氧烷 49.0g、用平均組成式 $CH_2=CH-CH_2-O(C_2H_4O)_{24}(C_3H_6O)_6-CH_3$ 表示的單側末端丙烯基聚醚 206.0g、用平均組成式 $C_4H_9-O(C_3H_6O)_{11}H$ 表示的聚丙二醇單丁醚(BuPPG)45 g，在流通氫氣的情況下邊攪拌邊加溫到 100°C。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯基/SiH 的物質比為 1.567。添加鉑-2,4,6,8-四甲基-2,4,6,8-四乙炔基四矽氧烷錯合物觸媒液(Pt 濃度 24.7wt%)10 μ l (相當於 0.012g) 後，經過 1.5 小時後反應液大致變得透明化。進行了合計 3 小時的反應。接著採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法確認後，發現反應已結束。但是，可觀察到相當量 (體積換算為 1 至 2 cm^3 左右) 的褐色的鉑觸媒凝集物 (凝膠狀) 附著在攪拌棒上，且凝膠顆粒大量懸浮在內容液中。

【0165】 對此進行過濾後，得到以 60 : 25 : 15 的比率含有用平均組成式 $MD_{43.3}D^*_{6.7}M$ (此處，* = $-C_3H_6O(C_2H_4O)_{24}(C_3H_6O)_6-CH_3$) 表示的聚醚改質聚矽氧、未反應聚醚及 BuPPG 的液狀的聚醚改質聚矽氧組成物。此處聚醚部分為氧化乙烯與氧化丙烯的隨機加合物。

<比較例 4-1>軟質泡沫用的界面活性劑

【0166】 在 500 mL 反應器中放入用平均組成式 $MD_{171}D^H_{19}M$ 表示的

含 SiH 基有機聚矽氧烷 48.0g、用平均組成式 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{12}-\text{H}$ 表示的單側末端丙烯基聚醚 (1)6.7g、用平均組成式 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{12}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_{16}-(\text{CO})\text{CH}_3$ 表示的單側末端丙烯基聚醚 (2)78.9g、用平均組成式 $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{25}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_{37}-(\text{CO})\text{CH}_3$ 表示的單側末端丙烯基聚醚(3)78.9g、用平均組成式 $\text{C}_4\text{H}_9-\text{O}(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_{11}\text{H}$ 表示的聚丙二醇單丁醚(BuPPG)37.5 g，在流通氫氣的情況下攪拌邊加溫到 100°C。另外，該氫化矽烷化反應中的丙烯基/SiH 的物質比為 1.31。添加鉑-2,4,6,8-四甲基-2,4,6,8-四乙基四矽氧烷錯合物觸媒液(Pt 濃度 24.7wt%)9 μl (相當於 0.01g) 後，15 分鐘後反應液變得基本透明。在這種狀態下進行了 3.5 小時的熟化後，採集反應液 1 g，藉由鹼分解氣體生成法進行確認後，轉化率為 75%，反應尚未結束。而且，相當量的褐色的鉑觸媒凝集物（凝膠狀）附著在攪拌棒上。為了使反應結束，在反應系中追加 BuPPG25g、所述丙烯基聚醚(2)及(3)各 14.7 g，進一步追加所述觸媒液 9 μl (相當於 0.01g)，以 125°C 進行了 3 小時的熟化，但轉化率沒有太大變化。不得已進一步在反應系中追加所述丙烯基聚醚(2)及(3)各 24.6 g，在經過 1 小時後確認情形時，出現產生凝膠化且內容液纏繞在攪拌棒上的現象。因此，就此結束實驗。

[反應溶劑或稀釋劑的物性]

【0167】 為了選定聚醚改質聚矽氧的合適的溶劑，將工業生產的若干候選化合物的物性數據顯示在下表 1 中。另外，考慮到作為聚胺酯泡沫用氣泡穩定劑的用途，為了減少來自泡沫的遷移，而將非反應性的化合物除外。此外，在冬季低溫下容易凝固的化合物及引火點低的化合物亦除外。

此處，表 1 的化學結構中，用(C₃H₆O)-H 表示的末端結構能夠含有同分異構物，但主要形成用-CH₂CH(CH₃)-OH 表示的仲醇羥基。

[表 1]：聚醚改質聚矽氧用溶劑（稀釋劑）

【表 1】

| No. | 簡稱 | 化學結構* | 黏度 [cs] (25°C) | 凝固點 or 流動 點 [°C] | 沸點 [°C] | 引火點 [°C] |
|------|---------|------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|---------------------------|-----------------|-------------|
| RE1 | ISA | Me ₂ CH-(CH ₂) ₁₅ -OH | 56 | < -30 | 292-302 | 194 |
| RE2 | TEXANOL | Me ₂ CH-(CO)O-CH ₂ CH Me ₂ -CH(OH)-CHMe ₂ | 13.6 | < -50 | 255-260 | 120 |
| RE3 | PPG | HO(C ₃ H ₆ O) _{6.6} -H | 68 | 45 | NA (Polymer) | 180 |
| RE4 | BuPPG | Butyl-O(C ₃ H ₆ O) _{10.5} -H | 70 | < -35 | NA (Polymer) | 210 |
| RE5 | PG | HO-(C ₃ H ₆ O)-H | 47 | < -57 | 187 | 99 |
| RE6 | DPG | HO-(C ₃ H ₆ O) ₂ -H | 73 | 39 | 232 | 132 |
| RE7 | TPG | HO-(C ₃ H ₆ O) ₃ -H | 56 | 41 | 265 | 141 |
| RE8 | PhEG | Phenyl-O-(C ₂ H ₄ O)-H | 20.5 | 14 | 245 | 127 |
| RE9 | PhDEG | Phenyl-O-(C ₂ H ₄ O) ₂ -H | > 20.5 | < -30 | 283 | 160 |
| RE10 | PhPG | Phenyl-O-(C ₃ H ₆ O)-H | 21.4 | 11 | 241 | 115 |
| RE11 | BuEG | Butyl-O(C ₂ H ₄ O)-H | 3 | < -70 | 171 | 62 |
| RE12 | BuDEG | Butyl-O(C ₂ H ₄ O) ₂ -H | 6 | < -70 | 230 | 107 |
| RE13 | BuTEG | Butyl-O(C ₂ H ₄ O) ₃ -H | 8 | 48 | 271 | 156 |
| RE14 | MeDPG | Me-O(C ₃ H ₆ O) ₂ -H | 3.8 | - 80 | 190 | 79 |
| RE15 | BuPG | Butyl-O(C ₃ H ₆ O)-H | 3.3 | - 80 | 170 | 62 |
| 1 | MeTPG | Me-O(C ₃ H ₆ O) ₃ -H | 5.5 | - 80 | 242 | 122 |
| 2 | BuDPG | Butyl-O(C ₃ H ₆ O) ₂ -H | 4.9 | < -60 | 229 | 106 |
| 3 | BuTPG | Butyl-O(C ₃ H ₆ O) ₃ -H | 7.3 | < -75 | 274 | 138 |
| 4 | PrDPG | Propyl-O(C ₃ H ₆ O) ₂ -H | 4.3 | < -60 | 212 | 94 |

* Phenyl=C₆H₅，Butyl=C₄H₉，Propyl=C₃H₇，Me=CH₃。

【0168】 表 1 列出的溶劑中，No.RE1 至 RE15 為不屬於本申請發明

的成分(B)的成分，No.1 至 No.4 為屬於本申請發明的成分(B)的成分。以下在這些成分中，作為聚醚改質聚矽氧組成物的溶劑從物性的角度來看對合適性進行比較。

【0169】 根據表 1 的數據，關於支鏈型高級醇即 ISA(異十八醇,RE1)及聚合物型稀釋劑即 PPG 衍生物(RE3,RE4)、二醇類(RE5 至 RE7)、苯基乙二醇衍生物(RE8 至 RE10)，其自身的黏度高，因此用於聚醚改質聚矽氧的稀釋的情況下，推測低黏度化的效果並不十分明顯。即，為了實現界面活性劑組成物的低黏度化，而需要增加這些稀釋劑的使用比率，可以看出與界面活性效率及異氰酸酯指數之間需要進行取捨。

【0170】 而且，ISA 在與多元醇及界面活性劑等高極性成分之間的相容性上存在課題，PPG 衍生物在與水的親和性上存在課題，苯醚衍生物存在通常熔點高且在聚胺酯泡沫產業上使用時過於昂貴的課題。TEXANOL(RE2)在黏度較低的方面良好，分子中與氧化烯基類似的結構要素少，因此在與親水性強的 PEG(聚乙二醇)均聚物的相容性上存在課題。

【0171】 因此，為了對與聚胺酯泡沫形成性組成物的處方及所配混各成分的相容性進行改良，進行泡沫特性的穩定化及改善、實現泡沫的穩定生產製程，優選從被稱為所謂「乙二醇醚類」的化合物組中只選擇適當的溶劑，與聚醚改質聚矽氧組合，作為界面活性劑溶液利用。考慮到安全性，該溶劑的引火點為 80℃ 以上，優選為 90℃ 以上。

【0172】 而且，作為近年來聚胺酯泡沫材料的市場需求，低排放性 (Low Emission) 的需求增高。這種需求有時表現為揮發成分少(Low VOC(Volatile Organic Compound))或 Low Emission (從泡沫向外部釋放的化

學物質少)、Low Fogging (不易引起從汽車內部使用的泡沫中揮發的成分附著後而在車窗玻璃等上產生霧氣的現象) 等要求, 但實質上意義基本相同。因此, 該溶劑有望在聚胺酯化反應的階段中被導入到聚胺酯骨架中, 並且優選為實質上不揮發性 (=具有 200°C 以上的沸點) 的溶劑。

【0173】 根據以上研究, 可認為上述表 1 列出的溶劑化合物中, 能夠作為聚醚改質聚矽氧組成物的溶劑適當使用的溶劑為 No.1 至 No.4 及 RE12、RE13。即, 其他的溶劑化合物作為溶劑自身的物性而具有某些不合適的物理性質, 因此不優選。進而, 如後述所示, 不具有仲醇羥基的溶劑 RE12、RE13 (含有伯醇羥基) 作為聚醚改質聚矽氧組成物的溶劑使用的情況下, 特別是作為合成溶劑使用的情況下, 從原料批次 (酸性雜質等) 不同引起再現性及副反應風險的大小、以及作為組成物的有用性及生產效率的角度來看, 與本申請發明相比較差。

[實施例、比較例所述的組成物的物性]

【0174】 關於上述實施例 1-1 至實施例 1-2、實施例 2-1 至實施例 4-1、比較例 1-1 至比較例 1-3, 所得各組成物的設計結構、內容、外觀、25°C 下的動黏度(mm^2/s)等如下述表 1 及表 2 所示。

[表 2]：各實施例中所得各試料的設計結構與內容等

【表 2】

| 實施例 No. | 反應性 | 組成物的性狀 | | 聚醚改質聚矽氧 (A)的結構 | | | | 溶劑 (B) | (A)/(B) 質量比 |
|---------|-----|-----------|---------|----------------|------|----------------------------|----------------------------|--------|-------------|
| | | 外觀 | 黏度 | m | n | t1/t2 | Y | | |
| 1-1 | 良好 | 透明 均勻 | 750 | 6.7 | 43.3 | 24/6 | Me | BuDPG | 93/7 |
| 1-2 | 良好 | 透明 均勻 | 369 | 6.7 | 43.3 | 24/6 | Me | BuDPG | 80/20 |
| 1-3 | - | 透明 均勻 | 216 | 6.7 | 43.3 | 24/6 | Me | BuDPG | 68/32 |
| 2-1 | 良好 | 透明 | No data | 5.0 | 78 | 22/22 | H | BuDPG | 80/20 |
| 3-1 | 良好 | 透明 | No data | 5.0 | 78 | 12/16 & 25/37 | Me & Me | BuDPG | 69/31 |
| 4-1 | 略低 | 基本 透明* | 23,770 | 19 | 171 | 12/0 & 12/16 & 25/37 | H & COCH3 & COCH3 | BuDPG | 66/34 |

注*)過濾前 (反應結束後) 有少量觸媒凝集物 (凝膠) 附著在攪拌棒上。

[表 3]：各比較例中所得各試料的設計結構與內容等

【表 3】

| 比較例 No. | 反應性 | 組成物的性狀 | | 聚醚改質聚矽氧 (A)的結構 | | | | 溶劑 (b) | (A)/(b) 質量比 |
|---------|-----|-----------|----------|----------------|------|----------------------------|----------------------------|-----------|-------------|
| | | 外觀 | 黏度 | m | n | t1/t2 | Y | | |
| 1-1 | 良好 | 透明 均勻 | 764 | 6.7 | 43.3 | 24/6 | Me | 無 | - |
| 1-2 | 良好 | 大致 透明* | 405 | 6.7 | 43.3 | 24/6 | Me | BuDE G | 80/20 |
| 1-3 | 良好 | 大致 透明* | 571 | 6.7 | 43.3 | 24/6 | Me | BuPP G | 80/20 |
| 4-1 | 不良 | 凝膠 | 無法 測定 | 19 | 171 | 12/0 & 12/16 & 25/37 | H & COCH3 & COCH3 | BuPP G | 66/34 |

注*)過濾前 (反應結束後) 有相當量的觸媒凝集物 (凝膠) 附著在攪拌棒上。

【0175】 比較例 1-3 及比較例 4-1 中，將作為聚醚改質聚矽氧的稀釋劑使用的聚二醇類(BuPPG)嘗試作為該共聚物的合成溶劑使用，可得知在該改質聚矽氧的分子量並不是非常大的前者的情況下，主反應即氫化矽烷化進行，能夠得到目標物，但是在改質聚矽氧的分子量略大的後者的情況下，主反應的進行極為遲緩，不僅反應沒有結束，在中途整個系還會凝膠化。作為其原因，可列舉出由於聚二醇類的分子量大，因此使含 SiH 基有機聚矽氧烷與單側末端含烯基聚醚相溶化的能力差、以及降低反應系的黏度而增加兩者接觸或混合的機會的效果差等方面。因此，推測主反應停滯期間，引起交聯的副反應以不可忽視的程度進行後，結果導致出現整個反應液凝膠結構化這種肉眼可見的現象。除此之外，即使在改質聚矽氧分子量不是非常大的比較例 1-3 的情況下，與實施例 1-1 及實施例 1-2 不同，可觀察到相當量的觸媒凝集物（凝膠）附著在攪拌棒上的現象。推測這是由於聚二醇類即 BuPPG 與觸媒之間的相溶性不夠，導致無法使觸媒有效地溶解或分散到整個反應系中，從而引起的現象。此外，這些聚二醇類通常並沒有被認為可以作為改質聚矽氧的反應溶劑加以利用，而且製造步驟中多數情況使用鹼觸媒，根據這些情況可以看出該原料的製造商沒有意識到將可能微量殘留的鹼分徹底地在所有製造批次中除去的必要性。因此，將這種原料用作氫化矽烷化反應的溶劑使用的情況下，推測該原料各製造批次的雜質水平變動會嚴重影響到反應（鹼導致鉑觸媒失去活性，從而造成反應停止等），難在工業規模上實現改質聚矽氧的穩定製造。進而，聚二醇類在分子中具有大量醚鍵，因此與空氣接觸後容易被氧化，容易生成過氧化物。

過氧化物亦會使鉑觸媒失去活性，使氫化矽烷化的觸媒循環中斷，因此將普通聚二醇類作為氫化矽烷化反應溶劑使用時，在工業生產上會造成明顯的負收益。

【0176】 比較例 1-1 中，產生聚醚改質聚矽氧的氫化矽烷化反應進行，但甲苯有毒、具有可燃性和疏水性，只要不置換溶劑，便無法產生本發明組成物。

【0177】 另一方面，比較例 1-2 中，將不屬於本發明的成分(B)的二乙二醇單丁醚(BuDEG)用作溶劑的情況下，主反應即氫化矽烷化進行，能夠得到目標物，但可觀察到相當量的觸媒凝集物（凝膠）附著在攪拌棒上的現象。推測這是由於 BuDEG 與觸媒之間的相溶性不夠，導致無法使觸媒有效地溶解或分散到整個反應系中，從而引起的現象。除此之外，BuDEG 是屬於 HAPs 規定(Hazardous Air Pollutants)的有害大氣污染物質相關法律的物質，在美國受到限制。因此，從安全性及環境適應性的角度來看，與實施例中使用的 BuDPG 相比，工業使用上限制大。

【0178】 過去，低分子量且重複單元少的乙二醇醚類在其結果及性質上類似點較多，因此作為所謂「乙二醇醚」統一對待的情況較多。但是，作為所述聚醚改質聚矽氧的反應溶劑兼殘留性稀釋劑進行詳細討論後，結果發現不具有仲醇經基的 EO 衍生物的乙二醇醚、與具有仲醇經基的 PO 衍生物的乙二醇醚之間，有用性產生巨大差異。實施例 1-2 中完全沒有發現反應結束後的內容液中產生凝膠狀物，但比較例 1-2 中觀察到在反應結束前相當量的觸媒凝集物（凝膠）附著在攪拌棒上的現象。這些觸媒凝集物特別是在以工業規模進行生產的情況下，會在過濾作業時堵塞過濾器或殘留在

反應容器中，是導致生產效率顯著惡化的原因，因此即使在實驗室規模下只觀察到少量，在工業生產上仍然非常不優選。除此之外，具有伯醇羥基的 BuDEG 中，該羥基的反應性高，因此反應系中共存有源自原料的微量酸性雜質的情況下，推測該羥基與含 SiH 基有機聚矽氧烷的反應點發生競爭反應而封端的可能性高，與氫化矽烷化反應的設計相比，得到低分子量（與聚矽氧烷主鏈鍵合的聚醚側鏈數更少）聚醚改質聚矽氧的風險亦高。由於存在這種擔心，在表 4 中示出比較例 1-1 至比較例 1-3 與實施例 1-1、實施例 1-2 的 GPC 分析結果的比較。在進行這種分析時，將比較例合成試驗中發生凝膠的過濾後的試料用於 GPC。

【0179】 上述 GPC 分析的測定條件如下所示。

<GPC 測定條件>

【0180】

溶離液：三氯甲烷（試劑特級）

測定溫度：40°C

檢測器：折射率計（正方向檢測出峰）

流速：1.0 mL/min

校準：利用標準聚苯乙烯實施

樣品溶液的注入量：100 μ L（試料濃度 1 重量%）

[表 4]：醇羟基性質與聚醚改質聚矽氧 GPC 數據的關係

【表 4】

| 試料 | 稀釋劑 (後添加) | 稀釋劑的 羟基的醇 性 | 共聚物的 數量平均分 子量 | 未反應聚醚 相對於共聚 物的峰面積 比% | SiOC 訊號的強度 (²⁹ Si-NMR) |
|------------|--------------|-------------------|---------------------|-------------------------------|---------------------------------------|
| 比較例 1-1 | 原料聚醚 | 無 | 23,700 | 175 | ND (未檢測到) |
| 實施例 1-1 | BuDPG | 仲醇 | 23,000 | 115 | ND (未檢測到) |
| 實施例 1-2 | BuDPG | 仲醇 | 23,600 | 122 | ND (未檢測到) |
| 比較例 1-2 | BuDEG | 伯醇 | 23,500 | 130 | ND (未檢測到) |
| 比較例 1-3 | BuPPG | 仲醇 | 23,700 | 149* | ND (未檢測到) |

注*)未反應聚醚的峰與稀釋劑即 BuPPG 的峰部分重合，已在計算中計數。

【0181】 關於上述分子量不是非常大的聚醚改質聚矽氧試料組，推測只要可根據 GPC 及 ²⁹Si NMR 進行判斷，便大致可正常得到目標物即聚醚改質聚矽氧（共聚物）。但是，對將具有伯醇羟基的 BuDEG 作為反應溶劑使用的比較例 1-2、與將具有仲醇羟基的 BuDPG 作為反應溶劑使用的實施例 1-1、實施例 1-2 的 GPC 進行比較後，可得知比較例相對於共聚物殘留的未反應聚醚的量更多。因此，以本次 ²⁹Si NMR 的靈敏度無法檢測出，推測這是比較例 1-2 中一部分不是原本應該反應的丙烷基聚醚的物質（從量來看是 BuDEG 的可能性較高）藉由脫氫反應將原料聚矽氧烷中的 Si-H 基消耗的緣故。

【0182】 即，推測末端羟基為仲醇羟基的、低分子量且重複單元少的乙二醇醚類不參與上述的競爭反應，有機氫聚矽氧烷與含丙烷基聚醚原料

之間的氫化矽烷化反應按照設計有選擇地進行，從而得到具有單一分子量分佈且具有接近設計結構的分子量的聚醚改質聚矽氧。

【0183】 如以上表 2 及表 4 所示，發現使用本申請發明的成分(B)即單醇有機化合物，從而可得到具有單一分子量分佈且接近設計分子結構的高有用性的聚醚改質聚矽氧組成物。而且，利用本專利發明的成分(B)製造而成的聚醚改質聚矽氧組成物的黏度降低效果（有助於提高操作性、生產效率及反應性）與比較例的稀釋劑等相比明顯優異。在發明人等所調查的範圍內，並未有報告特別提及作為本發明的所述聚醚改質聚矽氧的反應溶劑兼殘留性稀釋劑，本發明的成分(B)即在 5°C 下呈液狀，分子內具有 1 個仲醇羥基，且不含有氧以外之雜原子的特定乙二醇醚化合物有用的事例。

【0184】 進而，成分(B)即低分子量且重複單元少的乙二醇醚類通常經過蒸餾精製後再銷售，因此沒有雜質阻礙氫化矽烷化的問題，而且在分子結構上使含 SiH 基有機聚矽氧烷與單側末端含烯基聚醚相溶化的能力高，作為生成將副反應抑制在最小限度且具有單一主成分分子量分佈的聚醚改質聚矽氧組成物的反應溶劑兼稀釋劑有用。

[實施例、比較例所述的組成物的物性：水凝膠形成性]

【0185】 接著，本發明人等針對聚醚改質聚矽氧有在存在水的情況下增黏或形成水凝膠的趨勢，而使其使用受限的問題，對利用本發明的組成物進行解決的方法展開試驗。例如，想要調節開孔率或開放孔化的聚胺酯泡沫處方、需要預混液保存穩定性的情況、以及作為預先將若干成分混合的處方系統進行銷售的情況等已受到該問題的影響。此處，作為本發明的

聚醚改質聚矽氧組成物而採用實施例 1-1、實施例 1-2，作為利用過去技術製造而成的聚醚改質聚矽氧組成物而採用比較例 1-1、比較例 1-3，進行了兩者與水的混合性試驗。以下示出試驗方法。

<試驗方法>

【0186】 將聚醚改質聚矽氧組成物 40g 與水 20g 放入 200 ml 玻璃瓶中，在室溫下使用 HOMO DISPER 攪拌機進行 1600 rpm×5 分鐘的混合。觀察所得混合物調製後不久的性狀、以及在室溫下靜置一日後的性狀，並進行記錄。此處發現的結果如以下表 5 所示。

[表 5]：水混合性試驗的結果

【表 5】

| 試料 | 成分(A)% | 未反應聚醚% | 稀釋劑(B) or(b)% | 水% | 調製後不久的性狀 | 一日後的性狀 |
|---------|--------|--------|---------------|-----|----------|--------|
| 比較例 1-1 | 42% | 25% | NA | 33% | 透明黏稠液體 | 同左 |
| 實施例 1-1 | 45% | 19% | BuDPG 3% | 33% | 透明黏稠液體 | 同左 |
| 實施例 1-2 | 40% | 17% | BuDPG 10% | 33% | 低黏度透明液體 | 同左 |
| 比較例 1-3 | 40% | 17% | BuPPG 10% | 33% | 白濁黏稠液體 | 同左 |

【0187】 根據以上結果，可得知本發明的聚醚改質聚矽氧組成物與過去的聚醚改質聚矽氧組成物相比，即使在改質聚矽氧濃度高的情況下，與水接觸仍不易產生增黏及水凝膠形成，藉由增加本發明所述(B)成分的配混量，可有效消除所述問題。此外，亦可明確得知想要解決該課題，同時使

用所述聚醚改質聚矽氧(A)與本發明所述(B)成分來形成所述組成物是關鍵。另一方面，根據比較例 1-3 的水混和性試驗的結果可明確得知，將 BuPPG 用作稀釋劑的聚醚改質聚矽氧組成物與水的相溶性差且發生白濁，並未發現抑制水凝膠形成導致增黏的效果。

【0188】 如以上所示，本發明的聚醚改質聚矽氧組成物能夠廣泛用於想要調節開孔率或開放孔化的聚胺酯泡沫處方（例如軟質泡沫等）、需要預混液保存穩定性的情況、以及與硬質、軟質、HR 等用途無關均作為預先將若干成分混合的處方系統進行銷售的情況等。

[實施例、比較例所述的組成物的低溫穩定性]

【0189】 稱取上述實施例及比較例所述的組成物各約 28g 至 29g 放入 35 mL 玻璃瓶中，塞上塞子後，放入內部溫度 1°C 的防爆型冷藏庫，經過 2 小時，在變為恆溫的時間點，觀察各組成物的外觀，並進行記錄。結果總結在下表中。

【表 6】

| 試料 | 稀釋劑（後添加）的種類 | 組成物中的稀釋劑的量（質量%） | 外觀（25°C） | 外觀（1°C） |
|---------|-------------|-----------------|----------|---------|
| 比較例 1-1 | 原料聚醚 | 11.3 | 微濁~半透明液體 | 白濁液體 |
| 比較例 1-2 | BuDEG | 15 | 透明均勻液體 | 白濁液體 |
| 比較例 1-3 | BuPPG | 15 | 透明均勻液體 | 白濁液體 |
| 實施例 1-1 | BuDPG | 5 | 透明均勻液體 | 白濁液體 |
| 實施例 1-2 | BuDPG | 15 | 透明均勻液體 | 白濁液體 |
| 實施例 1-3 | BuDPG | 25 | 透明均勻液體 | 透明均勻液體 |
| 實施例 4-1 | BuDPG | 25 | 透明均勻液體 | 透明均勻液體 |

【0190】 根據以上結果，能夠發現從表中所示的 25°C/1°C 下的比較例 1-1 至比較例 1-3、實施例 1-1 至實施例 1-2 的外觀對比結果可知，用於反應的原料聚醚的 EO/PO 比（質量比）較大為 75/25 且聚醚鏈長較長的聚醚改質聚矽氧組成物在低溫下容易產生外觀的白濁，但增加本發明的稀釋劑即 BuDPG 的添加量到 25% 後，低溫穩定性得到飛躍性的提高，能夠維持與 25°C 時完全不變的透明均勻液體的外觀。進而，關於作為反應用原料聚醚之一而使用容易引起改質聚矽氧組成物外觀白濁的單丙稀基醚化 PEG-12 均聚物的實施例 4-1，發現雖然是以 25% 添加量使用本發明稀釋劑即 BuDPG 的組成物，但是低溫穩定性非常優異，能夠維持與 25°C 時完全不變的透明均勻液體的外觀。

[實施例、比較例所述的組成物的聚胺酯泡沫處方及試驗結果]

【0191】 進而，本發明人等基於對聚胺酯泡沫的種類、以及與其相符的聚醚改質聚矽氧的分子量的趨勢的知識，將下述實施例及比較例所述的試料配混到硬質聚胺酯泡沫處方中，實施了發泡試驗。作為本發明所述的聚醚改質聚矽氧組成物（試料），選擇分子量不是非常大的實施例 1-1，1-2，與利用藉由甲苯中反應進行製造的過去技術生產的聚醚-聚矽氧烷共聚物組成物即比較例 1-1 進行了比較。

<試驗方法>

【0192】 以下表 7 示出了經過測試的硬質泡沫處方。另外，使界面活性劑的添加份數（質量份）分 3 階段變化使其發泡，觀察泡沫的狀態。

[表 7]：硬質聚胺酯泡沫形成組成物

【表 7】

| 成分名 | 內容 | 添加份數 | 質量% | |
|-----------|----------------------------------------------------|----------------------------------------------------|-------------------|--------------------------|
| 預混用 成分 | 多元醇 | 山梨醇類聚醚多元醇 (羥基價 450) | 100 | 32.62 |
| | 叔胺觸媒 | $\text{Me}_2\text{N}-(\text{CH}_2)_6-\text{NMe}_2$ | 1.8 | 0.59 |
| | 水 | (發泡劑) * | 6.0 | 1.96 |
| | 聚醚改質聚矽氧 組成物 | 界面活性劑組成物 | 或 0.7 或 0.4 | 0.33 或 0.23 或 0.13 |
| 異氰酸酯 | 聚亞甲基聚苯基聚異 氰酸酯 (指數 110、 $\text{NCO}\%=31.5$) | 197.8 | 64.50 | |
| 合計 | | 306.6 ** | 100.00 ** | |

* 藉由與異氰酸酯的反應來產生二氧化碳。

** 界面活性劑的份數為 1.0 時的合計值

「硬質聚胺酯泡沫發泡體的形成」

【0193】 以合計量為表 6 的 16.7%的規模，調製本發明的聚胺酯泡沫形成組成物，並且形成聚胺酯泡沫發泡體。另外，作業在大約 25°C 的恆溫室內進行，原料亦全部在達到恆溫的狀態下使用。

<試驗方法>

【0194】 準確計量出多元醇、水、觸媒及界面活性劑後放入 200 ml 塑料杯中，利用圓盤葉片型 DISPER 攪拌機以 15 秒鐘 3500 rpm 進行攪拌。

【0195】 然後，將異氰酸酯添加到前述預先混合好的預混液中，使用相同的葉片以 7 秒鐘 3500 rpm 進行混合。

【0196】 將均勻混合的聚胺酯泡沫形成組成物用 8 秒鐘注入 1L 紙杯

中，使其自由發泡。

【0197】 以該狀態直接在恆溫室內靜置 40 至 60 分鐘。

【0198】 2 小時後，將各自的發泡體從上部切割為兩半，觀察泡沫高度及切割面的孔結構，並進行記錄。

[表 8]：硬質聚胺酯泡沫發泡體的評估結果

【表 8】

| 界面活性劑的 種類 | 活性劑 1.0 份 | | 活性劑 0.7 份 | | 活性劑 0.4 份 | |
|--------------|-----------|-----|-----------|-----|-----------|-----|
| | 泡沫高度 | 孔結構 | 泡沫高度 | 孔結構 | 泡沫高度 | 孔結構 |
| 比較例 1-1 | 基準 | 微細 | 基準 | 微細 | 基準 | 粗 |
| 實施例 1-1 | 與基準等同 | 微細 | 比基準略高 | 微細 | 比基準略高 | 略粗 |
| 實施例 1-2 | 與基準等同 | 微細 | 比基準略高 | 微細 | 比基準略高 | 略粗 |

【0199】 根據以上結果，發現使用包含本發明所述溶劑成分(B)的聚醚改質聚矽氧組成物的硬質聚胺酯泡沫發泡體、與溶劑使用甲苯的比較例 1-1 的組成物相比，硬質聚胺酯泡沫用的孔結構、泡沫高度均等同或優異，作為本發明的聚醚改質聚矽氧組成物的氣泡穩定劑或界面活性劑亦具有優異的效果和有用性。

【0200】 以下為適合使用實施例 2-1、3-1、4-1 中製造的軟質泡沫用界面活性劑的聚胺酯泡沫形成性組成物的處方例。

[表 9]：軟質聚胺酯泡沫形成組成物

【表 9】

| 成分名 | 內容 | 添加份數 | 質量% | |
|-------|---------------------|----------------------------------------------------------------|--------|-------|
| 預混用成分 | 多元醇 | 丙三醇類聚醚多元醇 (羥基價 56) | 100 | 53.95 |
| | 胺觸媒 | NN-二甲基乙醇胺/雙(2- 二甲基氨基乙基)醚/三 乙烯二胺/二丙二醇 =28/11/11/50 混合物 | 0.2 | 0.11 |
| | 水 | (發泡劑) * | 5.5 | 2.97 |
| | 二氯甲烷 | CH ₂ Cl ₂ | 10.0 | 5.39 |
| | 錫觸媒 | 辛酸錫 | 0.27 | 0.15 |
| | 聚醚改質聚矽 氧組成物 | 界面活性劑組成物 例) 實施例 2-1 或 實施例 3-1 或 實施例 4-1 | 0.8 | 0.43 |
| 異氰酸酯 | 甲苯二異氰酸酯 (指數 110) | 68.6 | 37.00 | |
| 合計 | | 185.37 | 100.00 | |

* 藉由與異氰酸酯的反應來產生二氧化碳。

[表 10]：軟質聚胺酯泡沫形成組成物

【表 10】

| 成分名 | 內容 | 添加份數 | 質量% | |
|-------|----------------------|--------------------------------------------------|--------|-------|
| 預混用成分 | 多元醇 | 丙三醇類聚醚多元醇 (羥基價 56) | 100 | 59.70 |
| | 胺觸媒 | 三乙烯二胺/二丙二 醇=33/67 混合物 | 0.2 | 0.12 |
| | | N-乙基嗎啉 | 0.1 | 0.06 |
| | 水 | (發泡劑) * | 3.3 | 1.97 |
| | 二氯甲烷 | CH ₂ Cl ₂ | 20.0 | 11.94 |
| | 錫觸媒 | 辛酸錫 | 0.6 | 0.36 |
| | 聚醚改質聚矽氧 組成物 | 界面活性劑組成物 例) 實施例 2-1 或 實施例 3-1 或 實施例 4-1 | 0.6 | 0.36 |
| 異氰酸酯 | 甲苯二異氰酸酯 (指 數 105) | 42.7 | 25.49 | |
| 合計 | | 167.50 | 100.00 | |

* 藉由與異氰酸酯的反應來產生二氧化碳。

【符號說明】

無

申請專利範圍

1. 一種聚醚改質聚矽氧組成物，其含有下述成分(A)及成分(B)，並且含有相對於整個組成物不超過 1 質量%之異丙醇(IPA)；

(A) 用下述通式(1)表示的 1 種或 2 種以上之聚醚改質聚矽氧：



(式中，R 分別獨立表示不具有脂肪族不飽和鍵的碳原子數 1 至 30 的 1 價烴基或含矽原子有機基，Q 分別獨立表示用式：
 $-C_x H_{2x} O - (C_2 H_4 O)_{t1} (C_3 H_6 O)_{t2} (C_4 H_8 O)_{t3} - Y$ 表示的含聚氧化烯基之有機基（式中，x、t1、t2 及 t3 為滿足 $2 \leq x \leq 8$ 、 $0 \leq t1 \leq 60$ 、 $0 \leq t2 \leq 50$ 、 $0 \leq t3 \leq 50$ 、 $2 \leq t1 + t2 + t3 \leq 110$ 的數，Y 從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、COCH₃ 基中選擇），a 及 b 分別為處於 $1.0 \leq a \leq 2.5$ 、 $0.0001 \leq b \leq 1.5$ 範圍的數)；

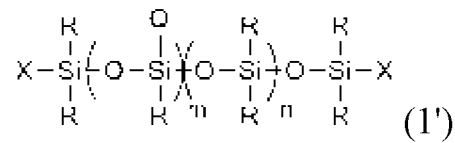
(B) 從以下(B1)或(B2)中選擇的 1 種或 2 種以上單醇有機化合物，其特徵在於，在 5°C 下呈液狀，其分子內具有 1 個仲醇羥基，且不含有氧以外之雜原子：

(B1) 乙二醇醚化合物，所述乙二醇醚化合物的末端氫原子被碳原子數 2 至 8 的烷基取代，且其他末端具有仲醇羥基，碳原子數 2 至 4 的氧化烯單元的重複數處於 2 至 3 的範圍；

(B2) 三丙二醇單甲醚。

2. 如申請專利範圍第 1 項之聚醚改質聚矽氧組成物，其中，成分(A)為用

下述通式(1')表示的直鏈狀聚醚改質聚矽氧；



(式中，R 及 Q 為與上述相同的定義，X 為 R 或 Q，n 為處於 0 至 1000 範圍的數，m 為處於 0 至 200 範圍的數；其中，m=0 時，X 的至少一個為 Q)。

3. 如申請專利範圍第 2 項之聚醚改質聚矽氧組成物，其中，通式(1')中，n、m 為處於 $25 \leq m+n \leq 230$ 範圍的數。
4. 如申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物，其中，通式(1)或通式(1')中，官能基 Q 係除了用 $-\text{C}_x\text{H}_{2x}\text{O}-(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_{t1}-\text{Y}$ 表示的含聚氧化乙烯基之有機基以外的含聚氧化烯基之有機基 ($2 \leq x \leq 8$ 、 $10 \leq t1 \leq 60$ ，Y 從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、 COCH_3 基中選擇)。
5. 如申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物，其中，成分(B)為選自由二丙二醇單丁醚、三丙二醇單丁醚、二丙二醇單(異)丙醚、三丙二醇單(異)丙醚、二丙二醇單乙醚、三丙二醇單乙醚、以及三丙二醇單甲醚所組成的群中 1 種或 2 種以上之單醇有機化合物。
6. 如申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物，其中，成分(B)為蒸餾精製後的 1 種或 2 種以上之單醇有機化合物。
7. 如申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物，其中，所述成分(A)及成分(B)的質量比處於 20/80 至 96/4 的範圍內。

8. 如申請專利範圍第 1 至 3 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物，其中，通式 (1) 或通式 (1') 中，官能基 Q 為用 $-C_xH_{2x}O-(C_2H_4O)_{t1}(C_3H_6O)_{t2}(C_4H_8O)_{t3}-Y$ 表示的含聚氧化烯基之有機基，式中，x、t1、t2 及 t3 為滿足 $2 \leq x \leq 8$ 、 $0 \leq t1 \leq 60$ 、 $1 \leq t2 \leq 50$ 、 $0 \leq t3 \leq 50$ 、 $6 \leq t1+t2+t3 \leq 50$ 的數，Y 從氫原子、碳原子數 1 至 4 的烷基、COCH₃ 基中選擇。
9. 一種界面活性劑，其含有申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物。
10. 一種整泡劑，其含有申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物。
11. 一種聚胺酯發泡體形成組成物，其含有申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物。
12. 一種聚胺酯發泡體形成組成物，其含有：
- (a) 多元醇、
 - (b) 聚異氰酸酯、
 - (c) 觸媒、
 - (d) 含有申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物的整泡劑、以及
 - (e) 從(d)成分以外的整泡劑、發泡劑、稀釋劑、鏈伸長劑、交聯劑、水、非水性發泡劑、填充劑、強化劑、顏料、染料、著色劑、阻燃劑、抗氧化劑、抗臭氧劑、紫外線穩定劑、防靜電劑、殺菌劑及抗菌劑所組成的群中任意選擇的至少一種添加成分。

13. 如申請專利範圍第 11 項或申請專利範圍第 12 項之聚胺酯發泡體形成組成物，其中，相對於(a)多元醇 100 質量份，以 0.3 至 8.0 質量份的範圍含有申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物中的(A)聚醚改質聚矽氧。
14. 一種聚胺酯發泡體，其由申請專利範圍第 11 至 13 項中任一項之聚胺酯發泡體形成組成物獲得。
15. 如申請專利範圍第 14 項之聚胺酯發泡體，其為硬質泡沫、半硬質泡沫、HR(高彈性)泡沫、軟質泡沫、或微孔泡沫，具有低排放性(Low Emission 特性)。
16. 一種化妝料原料，其含有申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物。
17. 一種化妝料，其含有申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物。
18. 一種申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，其至少包含：在實質上沒有溶劑的情況下開始有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化反應的步驟(I)、以及
添加所述成分(B)即單醇有機化合物進行稀釋或促進反應的步驟(II)。
19. 一種申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，其至少包含：在存在所述(B)成分即單醇有機化合物的情況下開始或進行有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物

之間的氫化矽烷化反應的步驟(I)。

20. 一種申請專利範圍第 1 至 8 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，其至少包含：在存在與所述成分(B)不同的揮發性有機溶劑(B')的情況下開始或進行有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化反應的步驟(I')、以及

將該揮發性有機溶劑(B')與所述成分(B)即單醇有機化合物進行溶劑交換的步驟(II')。

21. 如申請專利範圍第 18 至 20 項中任一項之聚醚改質聚矽氧組成物的製造方法，其以連續氫化矽烷化製程進行有機氫聚矽氧烷與分子鏈單側末端具有烯基的聚醚化合物之間的氫化矽烷化反應。